

DERWENT-ACC-NO: 2006-386309

DERWENT-WEEK: 200640

COPYRIGHT 2006 DERWENT INFORMATION LTD

TITLE: Organic electroluminescent element
manufacture, e.g. display element, involves degassing metal
complex having ligand with preset bonding positions and
performing vapor deposition

INVENTOR: YAMASAKI, K

PATENT-ASSIGNEE: FUJI PHOTO FILM CO LTD[FUJF]

PRIORITY-DATA: 2004JP-0329416 (November 12, 2004)

PATENT-FAMILY:

PUB-NO	PUB-DATE	LANGUAGE
PAGES MAIN-IPC		
JP 2006140059 A	June 1, 2006	N/A
149 H05B 033/10		

APPLICATION-DATA:

PUB-NO	APPL-DESCRIPTOR	APPL-NO
APPL-DATE		
JP2006140059A	N/A	2004JP-0329416
November 12, 2004		

INT-CL (IPC): C09K011/06, C23C014/12 , C23C014/24 , H01L051/50 ,
H05B033/10

ABSTRACTED-PUB-NO: JP2006140059A

BASIC-ABSTRACT:

NOVELTY - A vapor deposition material containing at least one metal complex having ligand with three or more bonding positions is subjected to degassing process. The processed material is heated and vapor deposited to form organic layers between electrodes to obtain organic electroluminescent element.

DETAILED DESCRIPTION - An INDEPENDENT CLAIM is included for organic electroluminescent element.

USE - For manufacturing organic electroluminescent element such as display element, backlight, illumination light source, recording light source, exposure light source, reading light source, signboard and optical communication.

ADVANTAGE - Manufacture of organic electroluminescent element having high luminous efficiency and durability for longer duration is enabled.

CHOSEN-DRAWING: Dwg.0/0

TITLE-TERMS: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT MANUFACTURE DISPLAY ELEMENT

DEGAS METAL COMPLEX LIGAND PRESET BOND POSITION
PERFORMANCE VAPOUR
DEPOSIT

DERWENT-CLASS: L03 U14

CPI-CODES: L03-G05F;

EPI-CODES: U14-J; U14-J01; U14-J01A; U14-J02D2;

SECONDARY-ACC-NO:

CPI Secondary Accession Numbers: C2006-124179

Non-CPI Secondary Accession Numbers: N2006-325636

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2006-140059

(P2006-140059A)

(43) 公開日 平成18年6月1日 (2006.6.1)

(51) Int. Cl.	F 1	テーマコード (参考)
H05B 33/10 (2006.01)	H05B 33/10	3K007
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06 660	4K029
C23C 14/12 (2006.01)	C23C 14/12	
C23C 14/24 (2006.01)	C23C 14/24 E	
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	
審査請求 未請求 請求項の数 11 O L (全 149 頁)		

(21) 出願番号 特願2004-329416 (P2004-329416)
 (22) 出願日 平成16年11月12日 (2004.11.12)

(71) 出願人 000005201
 富士写真フイルム株式会社
 神奈川県南足柄市中沼210番地
 (74) 代理人 100079049
 弁理士 中島 淳
 (74) 代理人 100084995
 弁理士 加藤 和詳
 (74) 代理人 100085279
 弁理士 西元 勝一
 (74) 代理人 100099025
 弁理士 福田 浩志
 (72) 発明者 山▲崎▼ 一樹
 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士写
 真フイルム株式会社内
 Fターム(参考) 3K007 AB03 AB11 AB18 DB03 FA01
 4K029 BA62 BD00 CA01 DB01 DB06

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子の製造方法、及び有機電界発光素子

(57) 【要約】

【課題】 高品質で性能ばらつきの少ない有機電界発光素子の製造方法を提供する。

【解決手段】 一对の電極間に、少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法であって、3座以上の配位子を有する金属錯体を少なくとも一種含有する蒸着材料を脱ガス処理する工程と、該脱ガス処理後に該蒸着材料を加熱して蒸着する工程と、を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一対の電極間に、少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法であって、3座以上の配位子を有する金属錯体を少なくとも一種含有する蒸着材料を脱ガス処理する工程と、該脱ガス処理後に該蒸着材料を加熱して蒸着する工程と、を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【請求項 2】

前記脱ガス処理する工程と前記蒸着する工程との間に、前記蒸着材料が大気下にさらされないことを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【請求項 3】

前記脱ガス処理する工程における蒸着材料の温度が、前記蒸着する工程における蒸着材料の温度と同じかまたは低いことを特徴とする請求項 1 又は 2 に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

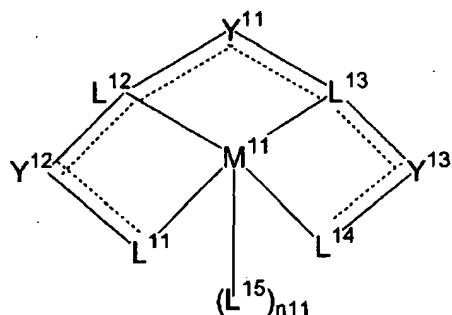
【請求項 4】

前記 3 座以上の配位子が、鎖状配位子であることを特徴とする請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【請求項 5】

前記 3 座以上の配位子を有する金属錯体下記一般式 (I) で表されることを特徴とする請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【化 1】



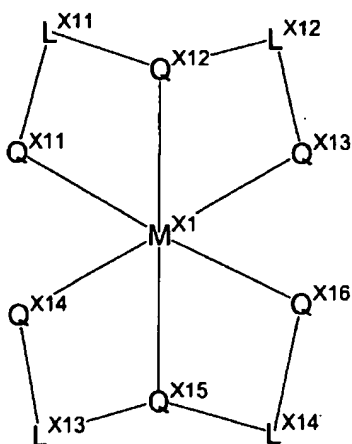
一般式 (I)

(一般式 (I) 中、 M^{11} は金属イオンを表し、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、 L^{14} 、 L^{15} はそれぞれ M^{11} に配位する配位子を表す。 $L^{11} \sim L^{14}$ 間に原子群がさらに存在して環状配位子を形成することは無い。 L^{15} は L^{11} 及び L^{14} の両方と結合して環状配位子を形成することはない。 Y^{11} 、 Y^{12} 、 Y^{13} はそれぞれ連結基、単結合、または二重結合を表す。また、 Y^{11} 、 Y^{12} 、又は Y^{13} が連結基である場合、 L^{11} と Y^{12} 、 Y^{12} と L^{12} 、 L^{12} と Y^{11} 、 Y^{11} と L^{13} 、 L^{13} と Y^{13} 、 Y^{13} と L^{14} の間の結合は、それぞれ独立に単結合または二重結合を表す。 n^{11} は 0 ～ 4 を表す。)

【請求項 6】

前記 3 座以上の配位子を有する金属錯体下記一般式 (II) で表されることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【化 2】



10

一般式(II)

(一般式 (I I) 中、 M^{X1} は金属イオンを表す。 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ は M^{X1} に配位する原子または M^{X1} に配位する原子を含んだ原子群を表す。 $L^{X11} \sim L^{X16}$ は単結合、二重結合または連結基を表す。すなわち、 $Q^{X11} - L^{X11} - Q^{X12} - L^{X12} - Q^{X13}$ からなる原子群および $Q^{X14} - L^{X13} - Q^{X15} - L^{X14} - Q^{X16}$ からなる原子群はそれぞれ三座の配位子である。 M^{X1} と $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。)

20

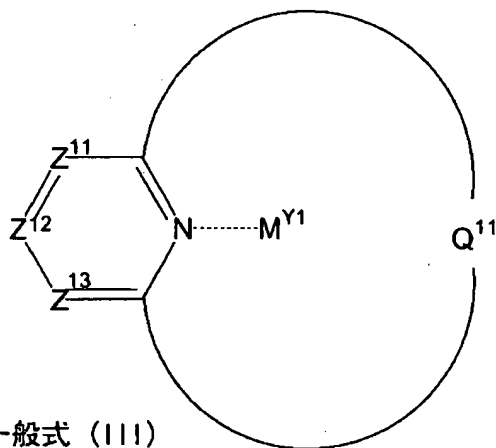
【請求項 7】

前記 3 座以上の配位子が環状配位子であることを特徴とする請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【請求項 8】

前記 3 座以上の配位子を有する金属錯体が下記一般式 (I I I) で表されることを特徴とする請求項 7 に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【化 3】



30

一般式 (III)

(一般式 (I I I) 中、 Q^{11} は含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{13} はそれぞれ置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表し、 M^{Y1} は更に配位子を有しても良い金属イオンを表す。)

40

【請求項 9】

前記 3 座以上の配位子を有する金属錯体中の金属イオンが白金イオン、イリジウムイオン

50

、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、および銅イオンの群から選ばれる少なくとも１種であることを特徴とする請求項１～８のいずれか１項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【請求項１０】

一対の電極間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子の製造方法であって、該少なくとも一層の有機層は、請求項１～９のいずれか１項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法を用いて形成されることを特徴とする有機電界発光素子の製造方法。

【請求項１１】

請求項１０に記載の製造方法を用いて形成されたことを特徴とする有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

10

【技術分野】

【０００１】

本発明は、電気エネルギーを光に変換して発光できる有機電界発光素子（以下、「発光素子」、または「ＥＬ素子」ともいう。）の製造方法に関し、またそれにより得られた有機電界発光素子に関する。

【背景技術】

【０００２】

今日、種々の表示素子に関する研究開発が活発であり、中でも有機電界発光（ＥＬ）素子は、低電圧で高輝度の発光を得ることができるため、有望な表示素子として注目されている。

20

一般に有機電界発光素子は、発光層もしくは発光層を含む複数の有機層を挟んだ対向電極から構成されており、陰極から注入された電子と陽極から注入された正孔が発光層において再結合し、生成した励起子からの発光を利用するもの、又は前記励起子からエネルギー移動によって生成する他の分子の励起子からの発光を利用するものである。

【０００３】

従来、有機電界発光素子の有機層の形成技術として真空蒸着法が知られている。真空蒸着法は、真空槽内で蒸発源と成膜用基板とを適当に組み合わせて蒸着材料を蒸着して、薄膜を形成するものである。ここで、蒸発源は蒸着材料、加熱源、及び収納容器をその構成要素とする意味で用いる。

蒸発源（加熱源）を作る手段も様々考えられており、比較的電気抵抗の高い金属容器（金属ボート）に電流を流し、その発熱により原料を蒸発させる、いわゆる抵抗加熱蒸着法が知られている。また、原料に直接電子ビームやレーザービームを照射し、そのエネルギーで原料を蒸発させる、いわゆる電子ビーム・レーザービーム蒸着法等も知られている。中でも抵抗加熱を用いた成膜方法（抵抗加熱蒸着法）は、成膜装置の構成が簡便であり、低価格で良質の薄膜形成を実現できることから広く普及している。

30

【０００４】

大気中の水素、水、一酸化炭素、二酸化炭素等の吸着物質が、蒸着材料を合成後又は蒸着に使用するまでの間に、蒸着材料、ルツボ等に付着する。基板や蒸着材料等の真空装置内への設置や、真空装置内の洗浄等のために、真空蒸着装置の真空状態を破ったりした場合にも同様に該吸着物質が付着する。

40

該吸着物質が有機薄膜発光素子内に混入すると、有機薄膜発光素子の電極から発光層へ注入される電子・正孔の注入効率の低下や、薄膜の化学変化を招く。その結果として、吸着物質の有機薄膜発光素子内への混入は、有機薄膜発光素子の輝度の低下等を引き起こす。

【０００５】

前記吸着物質を除去するために、例えば、有機薄膜発光素子の作製では、真空蒸着装置による有機薄膜成膜前に、蒸着源の脱ガス（ガス出し、デガスと呼ばれることもある）を行うための加熱、保温、冷却作業を行ってきた。あらかじめ真空装置外で脱ガス処理した材料を真空装置内に自動供給することが開示されている（例えば、特許文献１参照。）。

ルツボ内の蒸着材料の溶湯に供給蒸着材料を還元雰囲気中で加熱溶融し脱ガスしつつ供

50

給する手法が開示されている（例えば、特許文献2参照）。

【0006】

特に、有機電界発光素子の有機薄膜の作製では、有機材料の特性上、蒸気圧が高く分解、変性しやすいことにより、加熱により蒸着材料が分解や変性してしまい、輝度の低下、駆動耐久性の低下、輝度ムラ、ドット欠陥、リーク電流の発生等が生じやすく、蒸着材料を変性させずに、十分に脱ガスする技術が求められている。

【特許文献1】特開2004-22326号公報

【特許文献2】特開平5-255839号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

10

【0007】

上記のように、高品質な有機電界発光素子を安定に製造することのできる、有機電界発光素子の製造方法の開発が強く望まれていた。

【0008】

本発明は、高品質で性能ばらつきの少ない有機電界発光素子の製造方法を提供することを目的とするものである。

【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明者らは、前記実情に鑑み鋭意研究を行ったところ、上記課題を解決しうることを見出し本発明を完成した。

20

即ち、本発明は下記手段により達成されるものである。

【0010】

<1> 一対の電極間に、少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法であって、3座以上の配位子を有する金属錯体を少なくとも一種含有する蒸着材料を脱ガス処理する工程と、該脱ガス処理後に該蒸着材料を加熱して蒸着する工程と、を有する有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0011】

<2> 前記脱ガス処理する工程と前記蒸着する工程との間に、前記蒸着材料が大気下にさらされないことを特徴とする上記<1>に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

30

【0012】

<3> 前記脱ガス処理する工程における蒸着材料の温度が、前記蒸着する工程における蒸着材料の温度と同じかまたは低いことを特徴とする上記<1>又は<2>に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0013】

<4> 前記3座以上の配位子が、鎖状配位子であることを特徴とする上記<1>～<3>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

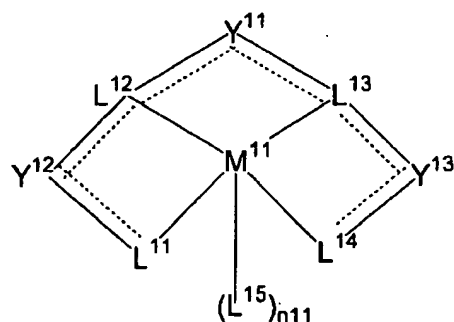
【0014】

<5> 前記3座以上の配位子を有する金属錯体が下記一般式(I)で表されることを特徴とする上記<1>～<3>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

40

【0015】

【化 1】



一般式(I)

【0016】

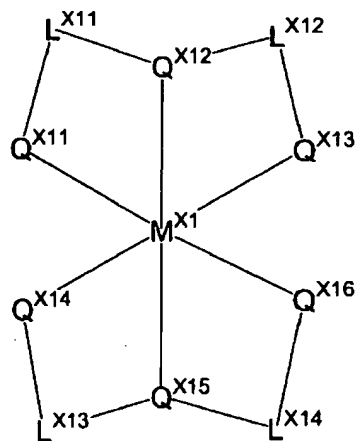
(一般式(I)中、 M^{11} は金属イオンを表し、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、 L^{14} 、 L^{15} はそれぞれ M^{11} に配位する配位子を表す。 L^{11} 、 L^{14} 間に原子群がさらに存在して環状配位子を形成することは無い。 L^{15} は L^{11} 及び L^{14} の両方と結合して環状配位子を形成することはない。 Y^{11} 、 Y^{12} 、 Y^{13} はそれぞれ連結基、単結合、または二重結合を表す。また、 Y^{11} 、 Y^{12} 、又は Y^{13} が連結基である場合、 L^{11} と Y^{12} 、 Y^{12} と L^{12} 、 L^{12} と Y^{11} 、 Y^{11} と L^{13} 、 L^{13} と Y^{13} 、 Y^{13} と L^{14} の間の結合は、それぞれ独立に単結合または二重結合を表す。 n^{11} は0~4を表す。)

【0017】

<6> 前記3座以上の配位子を有する金属錯体が下記一般式(II)で表されることを特徴とする上記<5>に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0018】

【化 2】



一般式(II)

【0019】

(一般式(II)中、 M^{x1} は金属イオンを表す。 $Q^{x11} \sim Q^{x16}$ は M^{x1} に配位する原子または M^{x1} に配位する原子を含んだ原子群を表す。 $L^{x11} \sim L^{x14}$ は単結合、二重結合または連結基を表す。すなわち、 $Q^{x11} - L^{x11} - Q^{x12} - L^{x12} - Q^{x13}$ からなる原子群および $Q^{x14} - L^{x13} - Q^{x15} - L^{x14} - Q^{x16}$ からなる原子群はそれぞれ三座の配位子である。 M^{x1} と Q

$X^{11} \sim Q^{16}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。）

【0020】

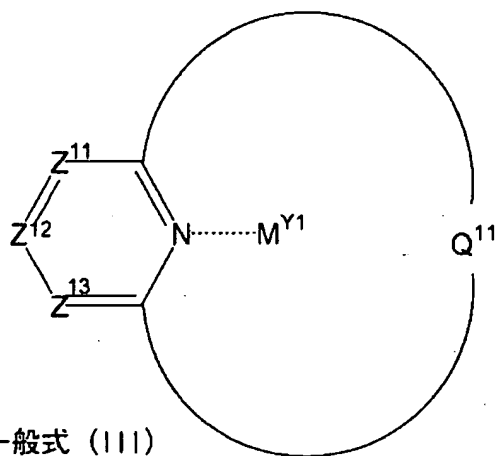
<7> 前記3座以上の配位子が環状配位子であることを特徴とする上記<1>～<3>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0021】

<8> 前記3座以上の配位子を有する金属錯体が下記一般式（III）で表されることを特徴とする上記<7>に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0022】

【化3】



【0023】

（一般式（III）中、 Q^{11} は含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{13} はそれぞれ置換又は無置換の、の炭素原子又は窒素原子を表し、 M^{Y1} は更に配位子を有しても良い金属イオンを表す。）

【0024】

<9> 前記3座以上の配位子を有する金属錯体中の金属イオンが白金イオン、イリジウムイオン、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、および銅イオンの群から選ばれる少なくとも1種であることを特徴とする上記<1>～<8>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法。

【0025】

<10> 一対の電極間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子の製造方法であって、該少なくとも一層の有機層は、上記<1>～<9>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子の有機層の製造方法を用いて形成されることを特徴とする有機電界発光素子の製造方法。

【0026】

<11> 上記<10>に記載の有機電界発光素子の製造方法を用いて形成されたことを特徴とする有機電界発光素子。

【発明の効果】

【0027】

本発明によれば、高い発光効率を示し、かつ耐久性にも優れた有機電界発光素子を長時間安定的に製造することのできる有機電界発光素子の有機層の製造方法を提供することができる。

また、本発明によれば、前記製造方法により得られる有機層を含む、高い発光効率を示し、かつ耐久性にも優れた有機電界発光素子の製造方法を提供することができる。

さらに、前記有機電界発光素子の製造方法により得られる有機電界発光素子を提供することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0028】

以下、本発明について詳細に説明する。

本発明の有機電界発光素子の有機層の製造方法は、3座以上の配位子を有する金属錯体（以下、「本発明の金属錯体」ともいう。）を少なくとも一種含有する蒸着材料を脱ガス処理する工程と、該脱ガス処理工程後に該蒸着材料を加熱して蒸着する工程と、を有することを特徴とする。

該工程を含むことにより、高品質で性能ばらつきの少ない有機電界発光素子の有機層の製造方法を提供することができる。

該有機層の製造方法は、脱ガス処理する工程、蒸着工程の他に、公知のその他の工程を含むことができる。 10

【0029】

本発明の有機電界発光素子の有機層の製造方法、該有機層を有する有機電界発光素子の製造方法、及び該有機電界発光素子について、該有機層の製造工程及び発光素子の要素の説明を通じて、以下に詳細に説明する。

【0030】

本発明の有機電界発光素子の有機層の製造方法は、前記蒸着工程より前に脱ガス処理する工程を有する必要がある。

【0031】

－脱ガス処理工程－

本発明の脱ガス処理する工程とは、3座以上の配位子を有する金属錯体を少なくとも一種含有する蒸着材料を蒸着する工程より前に、該蒸着材料や収納容器（ルツボ）を加熱することにより、該蒸着材料やルツボに吸着した水素、水、一酸化炭素、二酸化炭素等の吸着物質や、蒸着材料の不純物を気化させて除去する工程である。 20

本発明においては、工程の簡便化の観点から、脱ガス処理する工程と蒸着する工程とを同一真空装置内で行うことができる。

また、蒸着材料が大気下にさらされないことが好ましいが、大気下にさらされなければ、脱ガス処理する工程を行う真空装置と蒸着する工程を行う真空装置が異なっても良く、その場合は、その2つの真空装置間を真空搬送室等で接続して蒸着材料が大気下にさらされないように搬送すればよい。 30

【0032】

前記同一真空装置内で脱ガス処理工程と蒸着工程を行う具体的な例としては、例えば、真空装置内に設置された蒸着材料の充填されたルツボと蒸着される基板の間に可動シャッターを設置し、該シャッターを閉め、真空ポンプにより減圧下とした状態で、蒸着材料を所望の温度と時間加熱し、脱ガス処理を行う。このとき発生したガスは真空ポンプにより系外に排出される。

【0033】

前記脱ガス処理工程と蒸着工程とが異なる真空装置内で行われる具体的な例としては、例えば、脱ガス処理工程に用いられる真空装置と蒸着工程に用いられる真空装置が、真空搬送室で接続されており、脱ガス処理用の蒸着装置内で、上記と同様の脱ガス処理工程を行った後、蒸着材料を大気下にさらすことなく、脱ガス処理用の真空装置から蒸着工程用の真空装置内に搬送される。 40

【0034】

脱ガス処理の際の蒸着材料の温度は、脱ガスが十分行われれば、特に制限はないが、蒸着材料の分解の観点で、蒸着材料の蒸着温度と同じか、または低いことが好ましい。脱ガス処理工程の時間は、蒸着材料の量や、吸着物質あるいは不純物の量により異なるが、脱ガスが十分行われる時間で行われる。例えば、脱ガスの十分行われたかどうかは、真空装置内に設置した真空計で判断することができる。すなわち、脱ガス処理工程中はガスが発生するため、真空装置内の圧力は上昇する。圧力上昇が終われば、脱ガスが十分行われたと判断することができる。 50

前記加熱は、後述の蒸着工程の加熱と同様の方法を採用することができ、好ましい方法も同様である。

【0035】

脱ガス処理工程における真空度は、用いる蒸着材料、加熱等の条件に応じて脱ガスが効率的に行われれば特に限定されるものではないが、 10^{-2} Pa \sim 10^{-7} Pa が好ましく、中でも、 10^{-3} Pa \sim 10^{-7} Pa が特に好ましい。

前記脱ガス処理工程において要求される真空度は、真空装置内の蒸着材料を加熱する前であっても、また、加熱後の脱ガス処理中でも、その後であっても特に限定されるものではない。

【0036】

脱ガス処理工程は、更に脱ガス処理を効率的に行うためにその他の手段を講じることができる。

その他の手段としては特に限定されるものではなく、例えば、前記蒸着材料の攪拌等が挙げられる。

【0037】

ー蒸着工程ー

本発明における有機電界発光素子の有機層の製造方法は、該有機層を蒸着法により成膜する。

蒸着法とは、一般的には、通常高真空中 (10^{-2} Pa 以下) において物質を加熱蒸発させ、気体状となった物質をターゲット (基板) 上に付着成膜する真空蒸着法のことであるが、本明細書でいう蒸着法は、さらに広い意味で、蒸着技術すべてを含むものとし、例えば、ターゲット表面上での化学反応により膜を形成する CVD 法等も、本発明における蒸着法の範囲内とする。

蒸着法の詳細についてはオーム社刊、「新判・真空ハンドブック」(株式会社アルバック編)の第8章に記載されている。

【0038】

本発明における蒸着工程とは、加熱等により収納容器中の前記蒸着材料を蒸発させて、前記基板上に製膜する工程を言う。

該加熱等とは、蒸着材料を蒸発させる方法であれば特に限定されるものではなく、加熱する方法、及び加熱以外の方法等が挙げられる。

【0039】

前記蒸着材料を蒸発させる加熱方法としては、抵抗加熱法、高周波加熱法、電子ビーム加熱法、レーザー加熱法などがあるが、簡便さ (低コスト、簡単な装置で行える) の点で、抵抗加熱法が好ましい。これらの加熱方法は、前記収納容器を加熱した間接加熱であっても、また、蒸着材料を直接加熱するいずれの方法であってもよいが、収納容器を加熱した間接加熱であることが好ましい。

【0040】

また、前記加熱以外の方法で材料を蒸発させる方法としてスパッタリング法、イオンプレーティング法、分子線エピタキシ法などがあり、目的により使い分けることができる。

前記加熱温度としては、用いられる蒸着材料にも因るが、一般的に、 $100^{\circ}\text{C} \sim 1000^{\circ}\text{C}$ が挙げられ、 $100^{\circ}\text{C} \sim 500^{\circ}\text{C}$ が好ましい。

【0041】

2 種以上の物質の混合物で膜形成する場合には、1 つの収納容器に複数の物質の混合物を入れて蒸発させてもよいが、この方法では蒸発気体中の物質組成を一定に保つのが難しく、別々の蒸発源から同時に分子を飛ばす方法が一般的であり、本発明においても後者が好ましい。

【0042】

蒸着法で作成した有機層は、スピンコート法やインクジェット法に代表される湿式成膜法で作成した場合に比べて、溶媒やバインダ等に由来する不純物や酸素、水分を含まないため発光輝度や駆動耐久性の点で優れ、また既設の下層を溶媒により溶解する心配もなく

10

20

30

40

50

、所望の膜厚の均一な発光層薄膜を容易に得ることができる。

【0043】

さらに、蒸着時にマスキングを施すことにより、画素毎に異なる発光材料、ホスト材料を用いて異なる発光特性を持たせることができ、精細高画質のフルカラーディスプレイを作製するのに適している。

【0044】

—その他の工程—

前記有機電界発光素子の有機層の製造方法において、前記その他の工程としては、特に限定されるものではなく、公知の蒸着材料設置工程、基板搬送設置工程等を必要に応じて採用することができる。

【0045】

前記蒸着材料設置工程とは、蒸着材料を真空蒸着装置内に所望の位置に設置する工程を言い、脱ガス処理工程、蒸着工程の前に行う工程である。

本発明における前記蒸着材料は、3座以上の配位子を有する金属錯体を少なくとも一種有する材料であり、該金属錯体についての詳細は後述する。

該真空蒸着装置は後述の真空蒸着が可能な装置であれば特に限定されるものではなく、公知の装置が適宜選択されて用いることができる。

前記蒸着材料は、いずれの形態で設置されても良いが、収容容器に入れて設置することが好ましい。

該蒸着材料の収納容器とは、蒸着材料を収納でき、かつ蒸着するために用いられる後述の加熱方法又は加熱以外の方法等を用いることが出来るものであれば、容器の形状や材質には特に制限はなく、また、収納容器と該方法等の装置が同一であっても別々であっても良い。

収納容器の例としては、融点の高いタングステン、タンタル、モリブデン等の金属材料を薄板状に加工して、電気抵抗を高くした金属板、いわゆる金属ボートや、セル型ルツボがあげられる。

セル型ルツボの例としては、例えば、Kセル（クヌンセンセル）と呼ばれるルツボがあげられる。Kセルは、加熱コイルの内側に例えば窒化ボロン製のルツボが配置され、ルツボの内部に適量の蒸着材料が収容される。ルツボの外側にはその温度を正確に管理するためのタンタルなどで作られた熱遮蔽板が設けられ、ルツボの下側には熱電対が設けられている。加熱コイルに電流を流すと、ルツボが加熱され、蒸着材料が蒸発する。

【0046】

前記基板搬送設置工程とは、前記蒸着される基板を真空蒸着装置内の所定の位置に搬送し、設置する工程を言い、前記蒸着材料設置後、前記脱ガス処理前に行われる。

該搬送としては、大気圧下での手動搬送、遠隔操作による搬送、あるいは自動搬送により基板を搬送して設置しても良く、また、真空下での遠隔操作による搬送あるいは自動搬送で基板を設置しても良いが、量産の観点から、真空下で遠隔操作および／又は自動搬送により所定の位置に基板を搬送し設置することが好ましい。該遠隔操作及び自動搬送の方法は、特に限定されず、公知の方法を適宜用いることが出来る。

【0047】

次に、本発明中の3座以上の配位子を有する金属錯体について詳細に説明する。

該金属錯体において金属イオンに配位する原子は特に限定されないが、酸素原子、窒素原子、炭素原子、または硫黄原子が好ましく、酸素原子、窒素原子、又は炭素原子がより好ましく、窒素原子又は炭素原子が更に好ましい。

【0048】

金属錯体中の金属イオンは、特に限定されないが、イリジウムイオン、白金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、オスミウムイオン、希土類イオン（例えば、ユーロピウムイオン、カドリニウムイオン、テルビウムイオン）、パラジウムイオン、銅イオン、コバルトイオン、マグネシウムイオン、亜鉛イオン、ニッケルイオン、鉛イオン、アルミニウムイオンが好ましい。

【0049】

本発明における3座以上の配位子を有する金属錯体としては、3座以上6座以下の配位子を有する金属錯体がより好ましく、3座または4座の配位子を有する金属錯体がさらに好ましく、4座の配位子を有する金属錯体が特に好ましい。

【0050】

本発明における金属錯体の配位子は鎖状、又は、環状であることが好ましく、中心金属（例えば、後述する一般式（II）で表される化合物の場合であれば M^{11} を表す。）に窒素で配位する含窒素ヘテロ環（例えば、ピリジン環、キノリン環、ピロール環など）を少なくとも一つ有することが好ましい。該含窒素ヘテロ環としては、含窒素6員ヘテロ環であることがより好ましい。

10

【0051】

金属錯体の配位子が鎖状であるとは、金属錯体の配位子が環状構造をとらないことを意味する（例えば、ターピリジル配位子など。）。また、金属錯体の配位子が環状であるとは、金属錯体中の複数の配位子が互いに結合して、閉じた構造形成することを意味する（例えば、フタロシアニン配位子、クラウンエーテル配位子など。）。

【0052】

本発明における金属錯体が有する配位子が鎖状配位子である場合、該金属錯体は、以下に詳述する一般式（I）又は一般式（II）で表される化合物であることが好ましい。

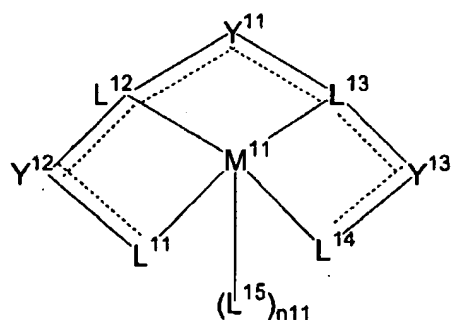
【0053】

まず、一般式（I）で表される化合物について説明する。

20

【0054】

【化4】



一般式(I)

30

【0055】

一般式（I）中、 M^{11} は金属イオンを表し、 $L^{11} \sim L^{15}$ はそれぞれ M^{11} に配位する配位子を表す。 L^{11} と L^{14} との間に原子群がさらに存在して環状配位子を形成することは無い。 L^{15} は L^{11} 及び L^{14} の両方と結合して環状配位子を形成することはない。 Y^{11} 、 Y^{12} 、 Y^{13} はそれぞれ連結基、単結合、または二重結合を表す。また、 Y^{11} 、 Y^{12} 、又は Y^{13} が連結基である場合、 L^{11} と Y^{12} 、 Y^{12} と L^{12} 、 L^{12} と Y^{11} 、 Y^{11} と L^{13} 、 L^{13} と Y^{13} 、 Y^{13} と L^{14} の間の結合は、それぞれ独立に、単結合又は二重結合を表す。 n^{11} は0～4を表す。

40

【0056】

一般式（I）で表される化合物について詳細に説明する。

一般式（I）中、 M^{11} は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されないが、2価または3価の金属イオンが好ましい。2価または3価の金属イオンとしては、白金イオン、イリジウムイオン、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、銅イオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、テルビウムイオンが

50

好ましく、白金イオン、イリジウムイオン、ユーロピウムイオンがより好ましく、白金イオン、イリジウムイオンがさらに好ましく、白金イオンが特に好ましい。

【0057】

一般式(I)中、 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} は、それぞれ独立に、 M^{11} に配位する配位子を表す。 L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} に含まれ、かつ、 M^{11} に配位する原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、又は炭素原子が好ましく、窒素原子、酸素原子、又は炭素原子がより好ましい。

【0058】

M^{11} と L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} でそれぞれ形成される結合は、それぞれ独立に、共有結合であってもイオン結合であっても配位結合であってもよい。本発明における配位子とは、説明の便宜上、配位結合のみならず他のイオン結合、共有結合により形成された場合においても用いるものとする。

L^{11} 、 Y^{12} 、 L^{12} 、 Y^{11} 、 L^{13} 、 Y^{13} 、及び L^{14} から成る配位子は、アニオン性配位子（少なくとも一つのアニオンが金属と結合する配位子）であることが好ましい。アニオン性配位子中のアニオンの数は、1～3が好ましく、1、2がより好ましく、2がさらに好ましい。

【0059】

M^{11} に炭素原子で配位する L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} としては、特に限定されないが、それぞれ独立にイミノ配位子、芳香族炭素環配位子（例えばベンゼン配位子、ナフタレン配位子、アントラセン配位子、フェナントラセン配位子など）、ヘテロ環配位子（例えばチオフェン配位子、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、及び、それらを含む縮環体（例えばキノリン配位子、ベンゾチアゾール配位子など）およびこれらの互変異性体）が挙げられる。

【0060】

M^{11} に窒素原子で配位する L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} としては特に限定されないが、それぞれ独立に、含窒素ヘテロ環配位子（例えば、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサジアゾール配位子、チアジアゾール配位子、及び、それらを含む縮環体（例えば、キノリン配位子、ベンズオキサゾール配位子、ベンズイミダゾール配位子など）、及び、これらの互変異性体（なお、本発明では通常の異性体以外に次のような例も互変異性体と定義する。例えば、後述する化合物(24)の5員ヘテロ環配位子、化合物(64)の末端5員ヘテロ環配位子、化合物(145)の5員ヘテロ環配位子もピロール互変異性体と定義する。))など、アミノ配位子（アルキルアミノ配位子（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばメチルアミノなどが挙げられる。）、アリールアミノ配位子（例えばフェニルアミノなどが挙げられる。）、アシルアミノ配位子（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニルアミノ配位子（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、アリールオキシカルボニルアミノ配位子（好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、スルホニルアミノ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。）、イミノ配位子など）が挙げられる。これらの配位子はさらに置換されていてもよい。

【0061】

M^{11} に酸素原子で配位する L^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び L^{14} としては特に限定されないが、

それぞれ独立に、アルコキシ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリールオキシ配位子（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。）、アシルオキシ配位子（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。）、シリルオキシ配位子（好ましくは炭素数3～40、より好ましくは炭素数3～30、特に好ましくは炭素数3～24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。）、カルボニル配位子（例えばケトン配位子、エステル配位子、アミド配位子など）、エーテル配位子（例えばジアルキルエーテル配位子、ジアリールエーテル配位子、フリル配位子など）などが挙げられる。

【0062】

M¹¹に硫黄原子で配位するL¹¹、L¹²、L¹³、及びL¹⁴としては特に限定されないが、それぞれ独立に、アルキルチオ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。）、アリールチオ配位子（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。）、ヘテロ環チオ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。）、チオカルボニル配位子（例えばチオケトン配位子、チオエステル配位子など）、又はチオエーテル配位子（例えばジアルキルチオエーテル配位子、ジアリールチオエーテル配位子、チオフリル配位子など）などが挙げられる。これらの置換配位子は更に置換されてもよい。

【0063】

L¹¹及びL¹⁴は、それぞれ独立に、芳香族炭素環配位子、アルキルオキシ配位子、アリールオキシ配位子、エーテル配位子、アルキルチオ配位子、アリールチオ配位子、アルキルアミノ配位子、アリールアミノ配位子、アシルアミノ配位子、含窒素ヘテロ環配位子（例えばピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサジアゾール配位子、チアジアゾール配位子、又は、それらを含む縮配位子体（例えば、キノリン配位子、ベンズオキサゾール配位子、ベンズイミダゾール配位子など）、又は、これらの互変異性体など）が好ましく、芳香族炭素環配位子、アリールオキシ配位子、アリールチオ配位子、アリールアミノ配位子、並びにピリジン配位子、ピラジン配位子、イミダゾール配位子、又は、それらを含む縮配位子体（例えば、キノリン配位子、キノキサリン配位子、ベンズイミダゾール配位子など）、又は、これらの互変異性体がより好ましく、芳香族炭素環配位子、アリールオキシ配位子、アリールチオ配位子、又はアリールアミノ配位子がさらに好ましく、芳香族炭素環配位子、又はアリールオキシ配位子が特に好ましい。

【0064】

L¹²及びL¹³は、それぞれ独立に、M¹¹と配位結合を形成する配位子が好ましく、M¹¹と配位結合を形成する配位子としては、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、トリアジン環、チアゾール環、オキサゾール環、ピロール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体（例えば、キノリン環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレニン環など）及び、これらの互変異性体が好ましく、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体（例えば、キノリン環、ベンズピロー

10

20

30

40

50

ルなど)、及び、これらの互変異性体がより好ましく、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、及び、それらを含む縮環体(例えば、キノリン環など)がさらに好ましく、ピリジン環、及び、ピリジン環を含む縮環体(例えば、キノリン環など)が特に好ましい。

【0065】

一般式(I)中、 L^{15} は M^{11} に配位する配位子を表す。 L^{15} は1~4座の配位子が好ましく、1~4座のアニオン性配位子がより好ましい。1~4座のアニオン性配位子としては特に限定されないが、ハロゲン配位子、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性2座配位子(例えば、ピコリン酸配位子、2-(2-ヒドロキシフェニル)-ピリジン配位子など)、 L^{11} 、 Y^{12} 、 L^{12} 、 Y^{11} 、 L^{13} 、 Y^{13} 、 L^{14} で形成される4座配位子が好ましく、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性2座配位子(例えば、ピコリン酸配位子、2-(2-ヒドロキシフェニル)-ピリジン配位子など)、 L^{11} 、 Y^{12} 、 L^{12} 、 Y^{11} 、 L^{13} 、 Y^{13} 、 L^{14} で形成される4座配位子がより好ましく、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性2座配位子(例えば、ピコリン酸配位子、2-(2-ヒドロキシフェニル)-ピリジン配位子など)がさらに好ましく、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)が特に好ましい。配位座の数、及び配位子の数が、金属の配位数を上回ることはない。但し、 L^{15} は L^{11} 及び L^{14} の両方と結合して環状配位子を形成することはない。

【0066】

一般式(I)中、 Y^{11} 、 Y^{12} 、及び Y^{13} は、それぞれ独立に、連結基、単結合、または二重結合を表す。連結基としては、特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、チオカルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、酸素原子連結基、窒素原子連結基、珪素原子連結基、又は、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。また、 Y^{11} 、 Y^{12} 、又は Y^{13} が連結基である場合、 L^{11} と Y^{12} 、 Y^{12} と L^{12} 、 L^{12} と Y^{11} 、 Y^{11} と L^{13} 、 L^{13} と Y^{13} 、 Y^{13} と L^{14} の間の結合は、それぞれ独立に、単結合又は二重結合を表す。

【0067】

Y^{11} 、 Y^{12} 、及び Y^{13} は、それぞれ独立に、単結合、二重結合、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン基が好ましい。 Y^{11} は、単結合、アルキレン基がより好ましく、アルキレン基がさらに好ましい。 Y^{12} 及び Y^{13} は、単結合、アルケニレン基がより好ましく、単結合がさらに好ましい。

【0068】

Y^{12} 、 L^{11} 、 L^{12} 、及び M^{11} で形成される環、 Y^{11} 、 L^{12} 、 L^{13} 、及び M^{11} で形成される環、 Y^{13} 、 L^{13} 、 L^{14} 、及び M^{11} で形成される環は、それぞれ環員数4~10が好ましく、環員数5~7がより好ましく、環員数5又は6がさらに好ましい。

【0069】

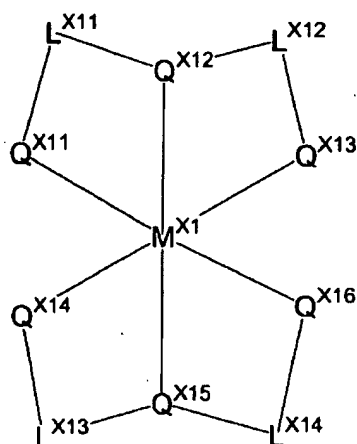
一般式(I)中、 n^{11} は0~4を表す。 M^{11} が配位数4の金属の場合、 n^{11} は0であり、 M^{11} が配位数6の金属の場合、 n^{11} は1、2が好ましく、1がより好ましい。 M^{11} が配位数6で n^{11} が1の場合 L^{15} は2座配位子を表し、 M^{11} が配位数6で n^{11} が2の場合 L^{15} は単座配位子を表す。 M^{11} が配位数8の金属の場合、 n^{11} は1~4が好ましく、1、2がより好ましく、1がより好ましい。 M^{11} が配位数8で n^{11} が1の場合 L^{15} は4座配位子を表し、 M^{11} が配位数8で n^{11} が2の場合 L^{15} は2座配位子を表す。 n^{11} が複数のときは、複数の L^{15} は同じであっても異なってもよい。

【0070】

次に、一般式(II)で表される化合物について説明する。

【0071】

【化 5】



一般式(II)

【0072】

一般式(II)中、 M^{X1} は金属イオンを表す。 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ は M^{X1} に配位する原子または M^{X1} に配位する原子を含んだ原子群を表す。 $L^{X11} \sim L^{X14}$ は単結合、二重結合または連結基を表す。

すなわち、一般式(II)においては、 $Q^{X11} - L^{X11} - Q^{X12} - L^{X12} - Q^{X13}$ からなる原子群、及び $Q^{X14} - L^{X13} - Q^{X15} - L^{X14} - Q^{X16}$ からなる原子群が、それぞれ三座の配位子を形成する。

また、 M^{X1} と $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。

【0073】

一般式(II)で表される化合物について詳細に説明する。

一般式(II)中、 M^{X1} は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されないが、1価～3価の金属イオンが好ましく、2価又は3価の金属イオンがより好ましく、3価の金属イオンがさらに好ましい。具体的には、白金イオン、イリジウムイオン、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、銅イオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、テルビウムイオンが好ましく、イリジウムイオン、ユーロピウムイオンがより好ましく、イリジウムイオンがさらに好ましい。

【0074】

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$ は、 M^{X1} に配位する原子又は M^{X1} に配位する原子を含んだ原子群を表す。

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$ が M^{X1} に配位する原子を表す場合、その具体的な原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、珪素原子、リン原子、硫黄原子などが挙げられ、好ましくは窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子であり、より好ましくは窒素原子、酸素原子である。

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$ が M^{X1} に配位する原子を含んだ原子群を表す場合、 M^{X1} に炭素原子で配位するものとしては、例えば、イミノ基、芳香族炭化水素環基（ベンゼン、ナフタレンなど）、ヘテロ環基（チオフェン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、チアゾール、オキサゾール、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾールなど）およびこれらを含む縮合環、およびこれらの互変異性体が挙げられる。

【0075】

M^{X1} に窒素原子で配位するものとしては、例えば、含窒素ヘテロ環基（ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、チアゾール、オキサゾール、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾールなど）、アミノ基（アルキルアミノ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であ

り、例えばメチルアミノ)、アリアルアミノ基(例えばフェニルアミノ)などが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリアルオキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、イミノ基などが挙げられる。これらの基はさらに置換されていてもよい。

【0076】

M^{X1} に酸素原子で配位するものとしては、アルコキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリアルオキシ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロ環オキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)、カルボニル基(例えばケトン基、エステル基、アミド基など)、エーテル基(例えばジアルキルエーテル基、ジアリアルエーテル基、フリル基など)などが挙げられる。

【0077】

M^{X1} に珪素原子で配位するものとしては、アルキルシリル基(好ましくは炭素数3~30であり、たとえば、トリメチルシリル基などが挙げられる。)、アリアルシリル基(好ましくは炭素数18~30であり、例えば、トリフェニルシリル基などが挙げられる。))等があげられる。これらの基はさらに置換されてもよい。

【0078】

M^{X1} に硫黄原子で配位するものとしては、アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリアルチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、チオカルボニル基(例えばチオケトン基、チオエステル基など)、チオエーテル基(例えばジアルキルチオエーテル基、ジアリアルチオエーテル基、チオフリル基など)などが挙げられる。

【0079】

M^{X1} にリン原子で配位するものとしては、ジアルキルホスフィノ基、ジアリアルホスフィノ基、トリアルキルホスフィン、トリアリアルホスフィン、ホスフィニン基等があげられる。これらの基はさらに置換されてもよい。

【0080】

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$ で表される原子群として好ましくは、 M^{X1} に、炭素原子で配位する芳香族炭化水素環基、炭素原子で配位する芳香族ヘテロ環基、窒素原子で配位する含窒素芳香族ヘテロ環基、アルキルオキシ基、アリアルオキシ基、アルキルチオ基、アリアルチオ基、

ジアルキルホスフィノ基であり、より好ましくは炭素原子で配位する芳香族炭化水素環基、炭素原子で配位する芳香族ヘテロ環基、窒素原子で配位する含窒素芳香族ヘテロ環基である。

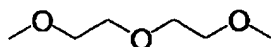
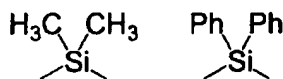
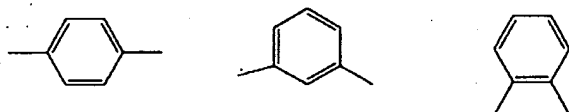
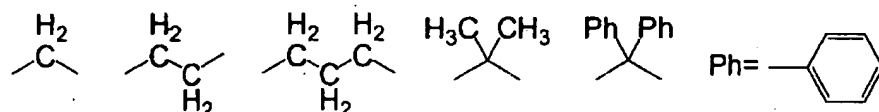
M^{X1} と $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。

【0081】

一般式(II)中、 $L^{X11} \sim L^{X14}$ は、単結合、二重結合、又は連結基を表す。連結基としては特に限定されないが、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子から選択される原子を含んで構成される連結基が好ましい。該連結の具体例を下記に示すが、これらに限定されることはない。

【0082】

【化6】



【0083】

これらの連結基はさらに置換されてもよく、置換基としては下記一般式(2)における $R^{21} \sim R^{24}$ で表される置換基として挙げたものが適用でき、好ましい範囲も同様である。 $L^{X11} \sim L^{X14}$ として好ましくは、単結合、ジメチルメチレン基、ジメチルシリレン基である。

【0084】

前記一般式(I)で表される化合物の好ましい形態は、以下に挙げる、一般式(1)、一般式(2)、一般式(3)、及び一般式(4)で表される各化合物である。

一般式(1)で表される化合物について説明する。

【0085】

10

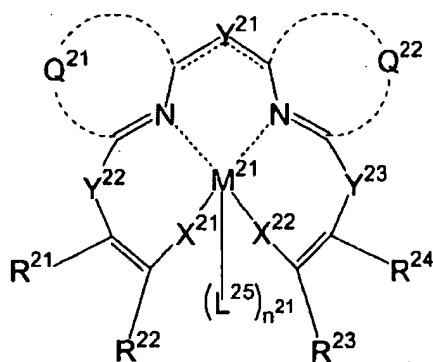
20

30

40

【化 7】

一般式 (1)



一般式 (1)

【0086】

一般式 (1) 中、 M^{21} は金属イオンを表し、 Y^{21} は連結基、単結合、または二重結合を表す。 Y^{22} 、 Y^{23} はそれぞれ単結合または連結基を表す。 Q^{21} 、 Q^{22} はそれぞれ含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、 Q^{21} で形成される環と Y^{21} の間の結合および Q^{22} で形成される環と Y^{21} の間の結合は、単結合または二重結合を表す。 X^{21} 、 X^{22} は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子を表す。 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、及び R^{24} は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、 R^{21} 及び R^{22} 並びに R^{23} 及び R^{24} は各々結合して環を形成してもよい。 L^{25} は M^{21} に配位する配位子を表す。 n^{21} は 0 ～ 4 の整数を表す。

【0087】

一般式 (1) について詳細に説明する。

一般式 (1) 中、 M^{21} は、前記一般式 (I) における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0088】

Q^{21} 、 Q^{22} は、それぞれ独立に、含窒素ヘテロ環 (M^{21} に配位する窒素を含む環) を形成する原子群を表す。 Q^{21} 、 Q^{22} で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、例えば、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、トリアジン環、チアゾール環、オキサゾール環、ピロール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレニン環など) 及び、これらの互変異性体が挙げられる。

【0089】

Q^{21} 、 Q^{22} で形成される含窒素ヘテロ環としては、好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサゾール環、ピロール環、ベンズアゾール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環など) 及び、これらの互変異性体であり、より好ましくはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、イミダゾール環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環など) 及び、これらの互変異性体であり、さらに好ましくは、ピリジン環、及び、その縮環体 (例えば、キノリン環など) であり、特に好ましくはピリジン環である。

【0090】

X^{21} 、 X^{22} は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子であり、酸素原子、硫黄原子、置換された窒素原子がより好ましく、酸素原子、硫黄原子がさらに好ましく、酸素原子が特に好ましい。

【0091】

Y^{21} は、前記一般式 (I) における Y^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0092】

Y^{22} 、 Y^{23} は、それぞれ独立に、単結合、連結基を表し、単結合が好ましい。連結基としては特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、チオカルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、酸素原子連結基、窒素原子連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

【0093】

Y^{22} 又は Y^{23} として表される連結基としては、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン連結基が好ましく、カルボニル連結基、アルケニレン連結基がより好ましく、カルボニル連結基がさらに好ましい。

10

【0094】

R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、及び R^{24} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表す。置換基としては特に限定されないが、例えば、アルキル基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメチル、エチル、*i*so-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、アリール基（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニル、*p*-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数0～30、より好ましくは炭素数0～20、特に好ましくは炭素数0～10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。）、

20

【0095】

アルコキシ基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリーロキシ基（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。）、アシル基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。）、アリーロキシカルボニル基（好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。）、

30

40

【0096】

アシルオキシ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。）、アシルアミノ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、アリーロキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフ

50

エニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数0~30、より好ましくは炭素数0~20、特に好ましくは炭素数0~12であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、

【0097】

カルバモイル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、

【0098】

リン酸アミド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。))などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

【0099】

R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、及び R^{24} は、それぞれ独立に、アルキル基、アリール基、 R^{21} と R^{22} または R^{23} と R^{24} が結合して環構造(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基が好ましく、 R^{21} と R^{22} 又は R^{23} と R^{24} が結合して環構造(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がより好ましい。

【0100】

L^{25} は前記一般式(I)における L^{15} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0101】

n^{21} は前記一般式(I)における n^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0102】

一般式(1)において、 Q^{21} 、 Q^{22} が形成する環がピリジン環のとき、 Y^{21} は連結基を表す金属錯体であること、 Q^{21} 、 Q^{22} が形成する環がピリジン環で、 Y^{21} が単結合または

二重結合で、 X^{21} 、 X^{22} が硫黄原子、置換または無置換の窒素原子を表す金属錯体であること、或いは、 Q^{21} 、 Q^{22} が形成する環が含窒素ヘテロ5員環、または、窒素原子を2つ以上含む含窒素6員環を表す金属錯体であることが好ましい。

【0103】

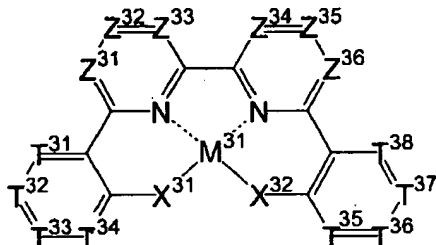
前記一般式(1)で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式(1-A)で表される化合物である。

【0104】

【化8】

一般式(1-A)

10



【0105】

20

一般式(1-A)について説明する。

一般式(1-A)中、 M^{31} は、前記一般式(I)における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0106】

Z^{31} 、 Z^{32} 、 Z^{33} 、 Z^{34} 、 Z^{35} 、及び Z^{36} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子がより好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における R^{21} で説明した基が挙げられ、また、 Z^{31} と Z^{32} 、 Z^{32} と Z^{33} 、 Z^{33} と Z^{34} 、 Z^{34} と Z^{35} 、 Z^{35} と Z^{36} が連結基を介して結合し、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成してもよく、 Z^{31} と T^{31} 、 Z^{36} と T^{38} が連結基を介して結合し、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成してもよい。

30

【0107】

前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がより好ましく、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がさらに好ましく、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基が特に好ましい。

【0108】

T^{31} 、 T^{32} 、 T^{33} 、 T^{34} 、 T^{35} 、 T^{36} 、 T^{37} 、及び T^{38} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子がより好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における R^{21} で説明した基が挙げられ、また、 T^{31} と T^{32} 、 T^{32} と T^{33} 、 T^{33} と T^{34} 、 T^{35} と T^{36} 、 T^{36} と T^{37} 、 T^{37} と T^{38} が連結基を介して結合し、縮環(例えばベンゾ縮環など)を形成しても良い。

40

【0109】

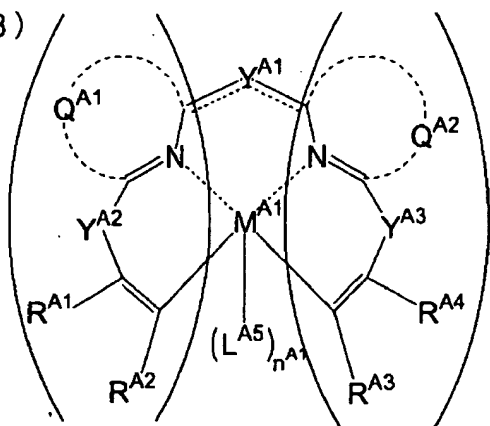
前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子がより好ましく、アリール基、ハロゲン原子がさらに好ましく、アリール基が特に好ましい。

【0110】

50

【化10】

一般式(3)



10

【0122】

一般式(3)中、 M^{A1} 、 Q^{A1} 、 Q^{A2} 、 Y^{A1} 、 Y^{A2} 、 Y^{A3} 、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 L^{A5} 、 n^{A1} は、前記一般式(1)における M^{21} 、 Q^{21} 、 Q^{22} 、 Y^{21} 、 Y^{22} 、 Y^{23} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 L^{25} 、 n^{21} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0123】

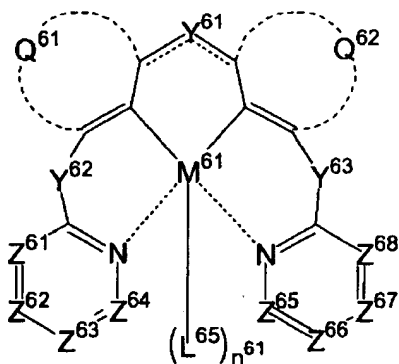
前記一般式(3)で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式(3-A)で表される化合物、及び下記一般式(3-B)で表される化合物である。

先ず、一般式(3-A)で表される化合物について説明する

【0124】

【化11】

一般式(3-A)



30

【0125】

一般式(3-A)中、 M^{61} は、前記一般式(I)における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

40

【0126】

Q^{61} 、 Q^{62} は、それぞれ独立に、環を形成する基を表す。 Q^{61} 、 Q^{62} で形成される環としては特に限定されないが、例えば、ベンゼン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、チオフェン環、イソチアゾール環、フラン環、イソオキサゾール環、及び、その縮環体が挙げられる。

【0127】

Q^{61} 、 Q^{62} で形成される環は、好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環、チオフェン環、チアゾール環、及び、その縮環体であり、ベンゼン環、ピリジン環、及び、その縮環体がいち好ましく、ベンゼン環、及び、その縮環体がさらに好ましい。

50

【0128】

Y^{61} は前記一般式(1)における Y^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0129】

Y^{62} 、 Y^{63} は、それぞれ独立に、連結基または単結合を表す。連結基としてはとくに限定されないが、例えば、カルボニル連結基、チオカルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、酸素原子連結基、窒素原子連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

【0130】

Y^{62} 、 Y^{63} は、それぞれ独立に、単結合、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン基が好ましく、単結合、アルケニレン基がより好ましく、単結合がさらに好ましい。

10

【0131】

L^{65} は前記一般式(1)における L^{15} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0132】

n^{61} は前記一般式(1)における n^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0133】

Z^{61} 、 Z^{62} 、 Z^{63} 、 Z^{64} 、 Z^{65} 、 Z^{66} 、 Z^{67} 、及び Z^{68} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における R^{21} で説明した基が挙げられ、また、 Z^{61} と Z^{62} 、 Z^{62} と Z^{63} 、 Z^{63} と Z^{64} 、 Z^{65} と Z^{66} 、 Z^{66} と Z^{67} 、 Z^{67} と Z^{68} が連結基を介して結合し、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成しても良い。 Q^{61} 、 Q^{62} で形成される環がそれぞれ Z^{61} 、 Z^{68} と連結基を介して結合し、環を形成してもよい。

20

【0134】

前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がより好ましく、アリール基、縮環(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がさらに好ましく、縮環(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基が特に好ましい。

【0135】

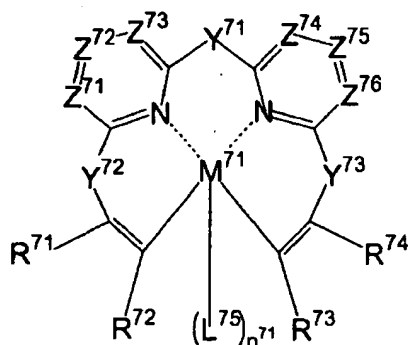
一般式(3-B)で表される化合物について説明する。

30

【0136】

【化12】

一般式(3-B)



40

【0137】

一般式(3-B)中、 M^{71} は前記一般式(1)における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0138】

50

Y^{71} 、 Y^{72} 、 Y^{73} は、それぞれ独立に、前記一般式(3-A)における Y^{62} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0139】

L^{75} は前記一般式(1)における L^{15} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0140】

n^{71} は前記一般式(1)における n^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0141】

Z^{71} 、 Z^{72} 、 Z^{73} 、 Z^{74} 、 Z^{75} 、及び Z^{76} は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における R^{21} で説明した基が挙げられる。また、 Z^{71} と Z^{72} 、 Z^{73} と Z^{74} が連結基を介して結合し、環(例えばベンゼン環、ピリジン環)を形成してもよい。 $R^{71} \sim R^{74}$ は前記一般式(1)における $R^{21} \sim R^{24}$ の置換基と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0142】

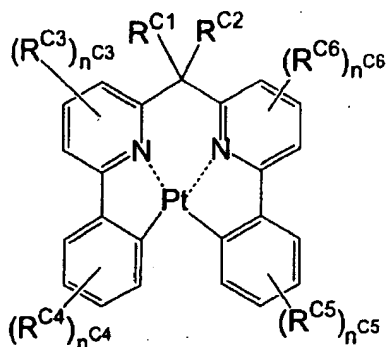
前記一般式(3-B)で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式(3-C)で表される化合物である。

一般式(3-C)で表される化合物について説明する。

【0143】

【化13】

一般式(3-C)



【0144】

一般式(3-C)中、 R^{C1} 、 R^{C2} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、置換基としては、前記一般式(1)における R^{21} ないし R^{24} の置換基として説明したアルキル基、アリール基を表す。 R^{C3} 、 R^{C4} 、 R^{C5} 、及び R^{C6} が表す置換基も前記一般式(1)における R^{21} ないし R^{24} の置換基と同義である。 n^{C3} 、 n^{C6} は0～3の整数、 n^{C4} 、 n^{C5} は0～4の整数を表し、 R^{C3} 、 R^{C4} 、 R^{C5} 、 R^{C6} をそれぞれ複数個有する場合、複数個の R^{C3} 、 R^{C4} 、 R^{C5} 、 R^{C6} は同じであっても異なってもよく、連結して環を形成してもよい。 R^{C3} 、 R^{C4} 、 R^{C5} 、 R^{C6} は、好ましくはアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン原子である。

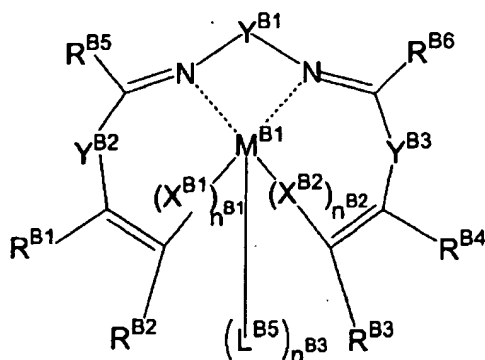
【0145】

一般式(4)で表される化合物について説明する。

【0146】

【化 1 4】

一般式 (4)



10

【0147】

一般式 (4) 中、 M^{B1} 、 Y^{B2} 、 Y^{B3} 、 R^{B1} 、 R^{B2} 、 R^{B3} 、 R^{B4} 、 L^{B5} 、 n^{B3} 、 X^{B1} 、 X^{B2} は、前記一般式 (1) における M^{21} 、 Y^{22} 、 Y^{23} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 L^{25} 、 n^{21} 、 X^{21} 、 X^{22} とそれぞれ同義であり好ましい範囲も同様である。

Y^{B1} は連結基を表し、前記一般式 (1) における Y^{21} と同様のものであり、好ましくは 1, 2 位で置換したビニル基、フェニレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環または炭素数 2～8 のメチレン基を表す。

20

R^{B5} 、 R^{B6} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、置換基としては前記一般式 (1) における R^{21} ないし R^{24} の置換基として説明したアルキル基、アリール基、ヘテロ環基を表す。ただし、 Y^{B1} は R^{B5} または R^{B6} と連結することはない。 n^{B1} 、 n^{B2} は、それぞれ独立に、0 ないし 1 の整数を表す。

【0148】

前記一般式 (4) で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式 (4-A) で表される化合物である。

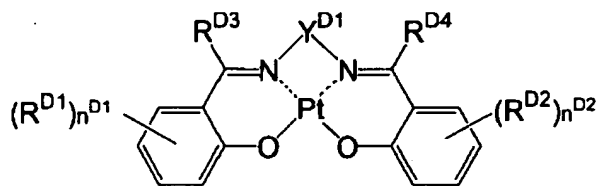
一般式 (4-A) で表される化合物について説明する

30

【0149】

【化 1 5】

一般式 (4-A)



40

【0150】

一般式 (4-A) 中、 R^{D3} 、 R^{D4} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、 R^{D1} 、 R^{D2} はそれぞれ置換基を表す。 R^{D1} 、 R^{D2} 、 R^{D3} 、及び R^{D4} が表す置換基としては、前記一般式 (4) における R^{B5} 、 R^{B6} が表す置換基と同義であり、好ましい範囲も同様である。 n^{D1} 、 n^{D2} は 0～4 の整数を表し、 R^{D1} 、 R^{D2} をそれぞれ複数個有する場合、複数個の R^{D1} 、 R^{D2} は同じであっても異なってもよく、連結して環を形成してもよい。 Y^{D1} は 1, 2 位で置換したビニル基、フェニレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環または炭素数 1～8 のメチレン基を表す。

50

【0151】

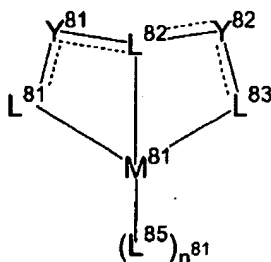
本発明における3座配位子を有する金属錯体の好ましい形態は、下記一般式(5)で表される化合物である。

一般式(5)で表される化合物について説明する。

【0152】

【化16】

一般式(5)



10

【0153】

一般式(5)中、 M^{81} は前記一般式(I)における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

【0154】

L^{81} 、 L^{82} 、及び L^{83} は、それぞれ独立に、前記一般式(I)における L^{11} 、 L^{12} 、 L^{14} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0155】

Y^{81} 、 Y^{82} は、それぞれ独立に、前記一般式(I)における Y^{11} 、 Y^{12} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0156】

L^{85} は M^{81} に配位する配位子を表す。 L^{85} は1~3座の配位子が好ましく、1~3座のアニオン性配位子がより好ましい。1~3座のアニオン性配位子としては特に限定されないが、ハロゲン配位子、 L^{81} 、 Y^{81} 、 L^{82} 、 Y^{82} 、 L^{83} で形成される3座配位子が好ましく、 L^{81} 、 Y^{81} 、 L^{82} 、 Y^{82} 、 L^{83} で形成される3座配位子がより好ましい。 L^{85} が金属を介さずに L^{81} 、 L^{83} と連結することはない。配位座の数、及び配位子の数が、金属の配位数を上回ることはない。

30

【0157】

n^{81} は0~5を表す。 M^{81} が配位数4の金属の場合、 n^{81} は1であり、 L^{85} は単座配位子を表す。 M^{81} が配位数6の金属の場合、 n^{81} は1~3が好ましく、1、3がより好ましく、1がさらに好ましい。 M^{81} が配位数6で n^{81} が1の場合 L^{85} は3座配位子を表し、 M^{81} が配位数6で n^{81} が2の場合 L^{85} は単座配位子1つと2座配位子1つを表し、 M^{81} が配位数6で n^{81} が3の場合 L^{85} は単座配位子を表す。 M^{81} が配位数8の金属の場合、 n^{81} は1~5が好ましく、1、2がより好ましく、1がより好ましい。 M^{81} が配位数8で n^{81} が1の場合 L^{85} は5座配位子を表し、 n^{81} が2の場合 L^{85} は3座配位子1つと2座配位子1つを表し、 n^{81} が3の場合 L^{85} は3座配位子1つと単座配位子2つ、または、2座配位子2つと単座配位子1つを表し、 n^{81} が4の場合 L^{85} は2座配位子1つと単座配位子3つを表し、 n^{81} が5の場合 L^{85} は単座配位子5つを表す。 n^{81} が複数のときは、複数の L^{85} は同じであっても異なってもよい。

40

【0158】

前記一般式(5)の好ましい形態は、前記一般式(5)の L^{81} 、 L^{82} 、 L^{83} が炭素原子で M^{81} に配位する芳香族炭素環またはヘテロ環、または窒素原子で M^{81} に配位する含窒素ヘテロ環を表し、 L^{81} 、 L^{82} 、 L^{83} のうち少なくとも一つが含窒素ヘテロ環である。これら炭素原子で配位する芳香族炭素環、ヘテロ環および窒素原子で配位する含窒素ヘテロ環

50

は前記一般式 (I) で説明した M^{11} に炭素原子で配位する配位子および窒素原子で配位する例が挙げられ、好ましい範囲も同様である。 Y^{81} 、 Y^{82} は好ましくは単結合ないしはメチレン基を表す。

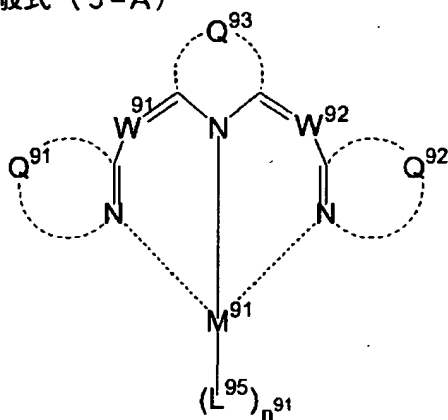
前記一般式 (5) で表される化合物の他の好ましい形態は、下記一般式 (5-A) で表される化合物、及び下記一般式 (5-B) で表される化合物である。

先ず、一般式 (5-A) で表される化合物について説明する。

【0159】

【化17】

一般式 (5-A)



10

20

【0160】

一般式 (5-A) 中、 M^{91} は前記一般式 (5) における M^{81} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0161】

Q^{91} 、 Q^{92} は含窒素ヘテロ環 (M^{91} に配位する窒素を含む環) を形成する基を表す。 Q^{91} 、 Q^{92} で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、例えば、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、チアゾール環、オキサゾール環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレニン環など) 及び、これらの互変異性体が挙げられる。

30

【0162】

Q^{91} 、 Q^{92} で形成される含窒素ヘテロ環は、好ましくは、ピリジン環、ピラゾール環、チアゾール環、イミダゾール環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環、ベンズチアゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレニン環など)、及び、これらの互変異性体であり、より好ましくはピリジン環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環など)、及び、これらの互変異性体、さらに好ましくは、ピリジン環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環など) であり、特に好ましくはピリジン環である。

40

【0163】

Q^{93} は含窒素ヘテロ環 (M^{91} に配位する窒素を含む環) を形成する基を表す。 Q^{93} で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、ピロール環、イミダゾール環、トリアゾール環の互変異性体、及び、それらを含む縮環体 (例えばベンズピロールなど) が好ましく、ピロール環の互変異性体及びピロール環を含む縮環体 (例えばベンズピロールなど) の互変異性体がより好ましい。

【0164】

W^{91} 、 W^{92} は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における W^{51} 、 W^{52} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0165】

50

L^{95} は前記一般式(5)における L^{85} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0166】

n^{91} は前記一般式(5)における n^{81} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

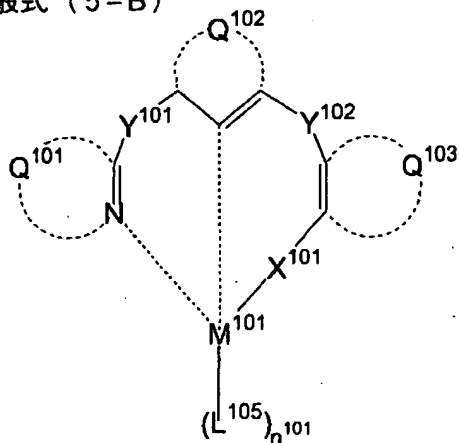
【0167】

一般式(5-B)で表される化合物について説明する。

【0168】

【化18】

一般式(5-B)



10

20

【0169】

一般式(5-B)中、 M^{101} は、前記一般式(5)における M^{81} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0170】

Q^{102} は、前記一般式(1)における Q^{21} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0171】

Q^{101} は前記一般式(5-A)における Q^{91} と同義であり、好ましい範囲も同じである 30

【0172】

Q^{103} は芳香環を形成する基を表す。 Q^{103} で形成される芳香環としては特に限定されないが、ベンゼン環、フラン環、チオフェン環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体(例えば、ナフタレン環など)が好ましく、ベンゼン環及びベンゼン環を含む縮環体(例えば、ナフタレン環など)がより好ましく、ベンゼン環が特に好ましい。

【0173】

Y^{101} 、 Y^{102} は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における Y^{22} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0174】

L^{105} は前記一般式(5)における L^{85} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

40

【0175】

n^{101} は前記一般式(5)における n^{81} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0176】

X^{101} は前記一般式(1)における X^{21} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0177】

本発明における三座配位子を有する金属錯体の他の好ましい態様は、前記一般式(II)で表される化合物であるが、前記一般式(II)で表される化合物のうち、より好ましくは下記一般式(X2)で表される化合物であり、更に好ましくは下記一般式(X3)で表される化合物である。

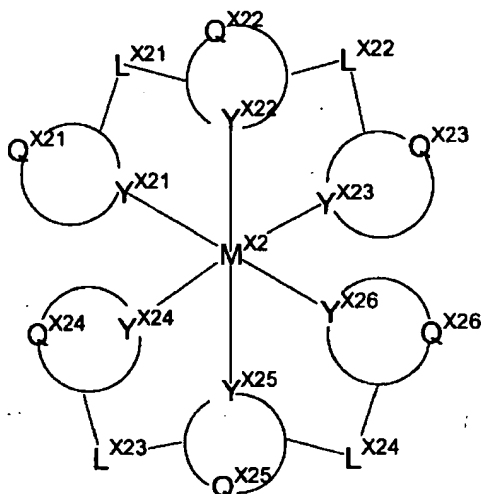
50

まず、一般式 (X2) で表される化合物について説明する。

【0178】

【化19】

一般式 (X2)



10

20

【0179】

一般式 (X2) 中、 M^{X2} は金属イオンを表す。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ は M^{X2} に配位する原子を表し、 $Q^{X21} \sim Q^{X26}$ は、それぞれ $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ と共に芳香環もしくは芳香族ヘテロ環を形成する原子群を表す。 $L^{X21} \sim L^{X24}$ は単結合、二重結合または連結基を表す。 M^{X2} と $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。

【0180】

一般式 (X2) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (X2) 中、 M^{X2} は、前記一般式 (II) における M^{X1} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ は M^{X2} に配位する原子を表す。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ と M^{X2} との結合は配位結合でも共有結合でもよい。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、りん原子、ケイ素原子が挙げられ、好ましくは炭素原子、窒素原子である。 $Q^{X21} \sim Q^{X26}$ は、それぞれ $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ を含んで芳香族炭化水素環または芳香族ヘテロ環を形成する原子群を表す。この場合に形成する芳香族炭化水素環、芳香族ヘテロ環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、チオフエン環、フラン環が挙げられ、好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環であり、さらに好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピラゾール環、トリアゾール環であり、特に好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。これらはさらに縮環を有していても置換基を有していても良い。

30

40

【0181】

$L^{X21} \sim L^{X24}$ は前記一般式 (II) における $L^{X11} \sim L^{X14}$ と同義であり好ましい範囲も同様である。

【0182】

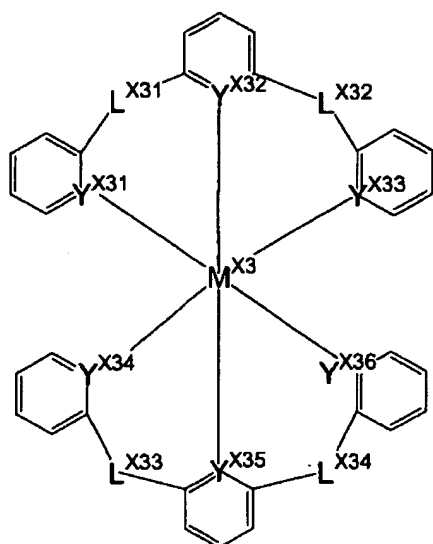
前記一般式 (II) で表される化合物は、さらに好ましくは下記一般式 (X3) で表される化合物である。

一般式 (X3) について説明する。

【0183】

【化 20】

一般式 (X3)



10

20

【0184】

一般式 (X3) 中、 M^{X3} は金属イオンを表す。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ は、炭素原子、窒素原子、リン原子を表す。 $L^{X31} \sim L^{X34}$ は単結合、二重結合または連結基を表す。 M^{X3} と $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。

【0185】

M^{X3} は前記一般式 (II) における M^{X1} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ は M^{X3} に配位する原子を表す。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ と M^{X3} との結合は配位結合でも共有結合でも良い。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ としては、炭素原子、窒素原子、りん原子が挙げられ、好ましくは炭素原子、窒素原子である。 $L^{X31} \sim L^{X34}$ は前記一般式 (II) における $L^{X11} \sim L^{X14}$ と同義であり好ましい範囲も同様である。

30

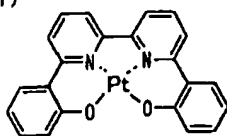
【0186】

前記一般式 (I)、一般式 (II)、及び一般式 (5) で表される化合物の具体例としては、特願 2004-162849 号明細書に記載の化合物 (1) ~ 化合物 (242) (以下に構造を示す。) が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

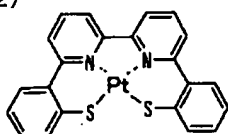
【0187】

【化 2 1】

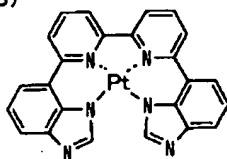
化合物(1)



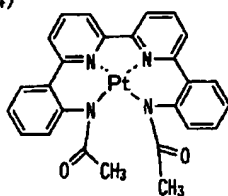
化合物(2)



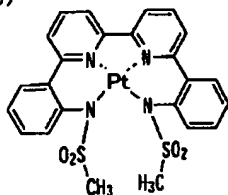
化合物(3)



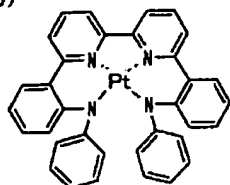
化合物(4)



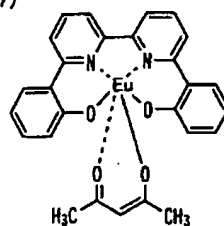
化合物(5)



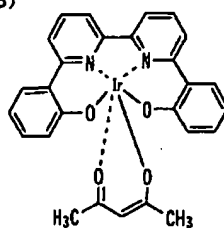
化合物(6)



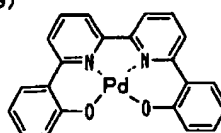
化合物(7)



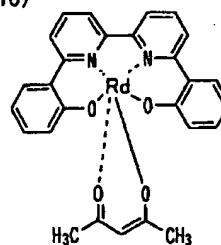
化合物(8)



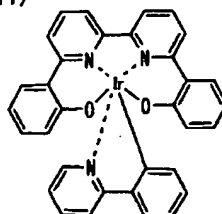
化合物(9)



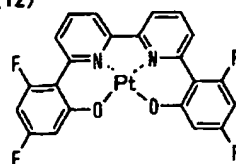
化合物(10)



化合物(11)

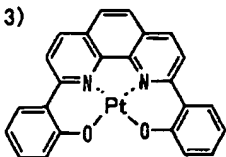


化合物(12)

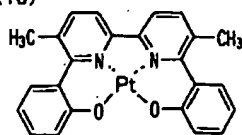


【化 2 2】

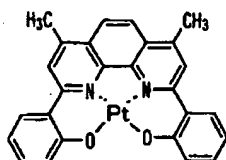
化合物(13)



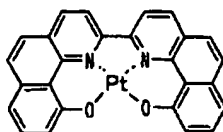
化合物(18)



化合物(14)

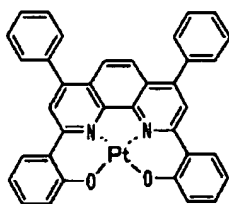


化合物(19)

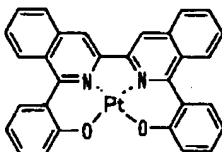


10

化合物(15)

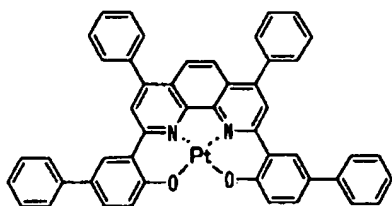


化合物(20)

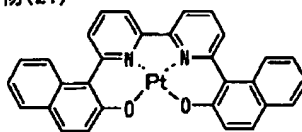


20

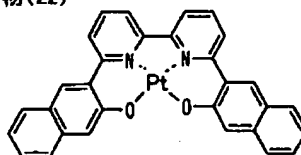
化合物(16)



化合物(21)

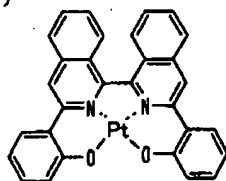


化合物(22)

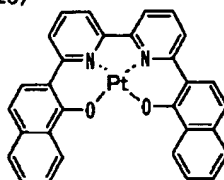


30

化合物(17)



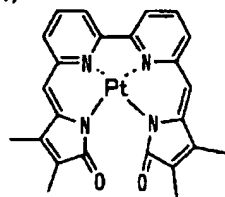
化合物(23)



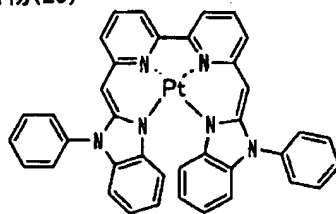
40

【化 2 3】

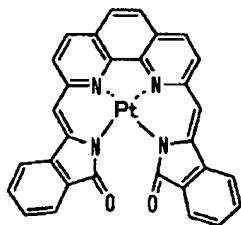
化合物(24)



化合物(29)

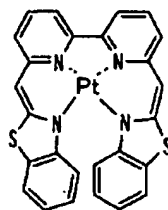


化合物(25)

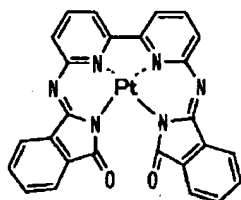


10

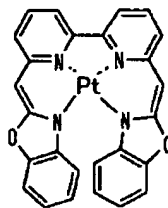
化合物(30)



化合物(26)

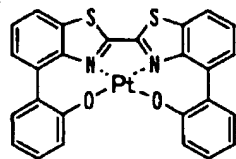


化合物(31)

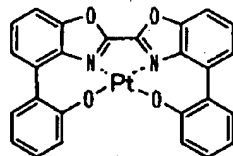


20

化合物(27)

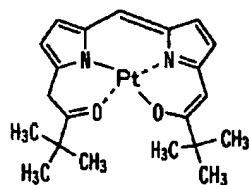


化合物(32)



30

化合物(28)

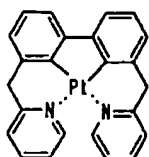


40

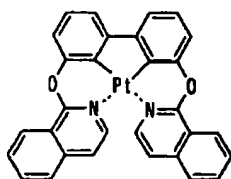
【0190】

【化 2 4】

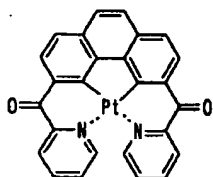
化合物(33)



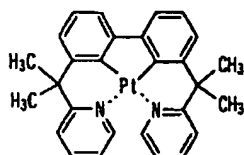
化合物(34)



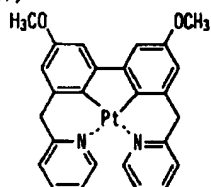
化合物(35)



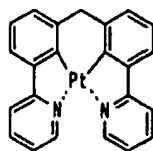
化合物(36)



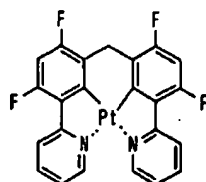
化合物(37)



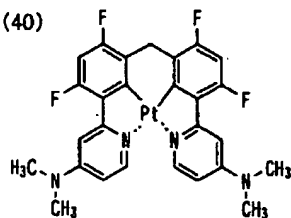
化合物(38)



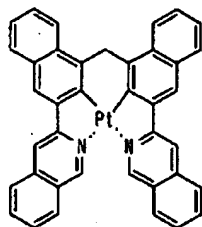
化合物(39)



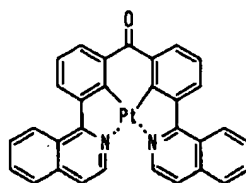
化合物(40)



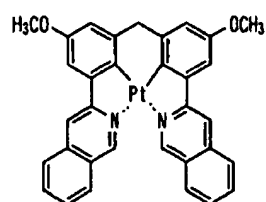
化合物(41)



化合物(42)



化合物(43)



10

20

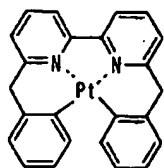
30

40

【0191】

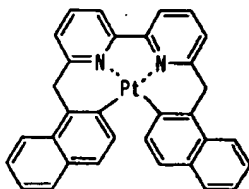
【化 2 5】

化合物(44)



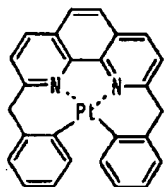
化合物(45)

10



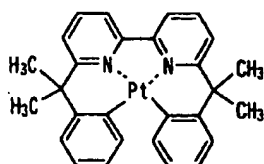
化合物(46)

20



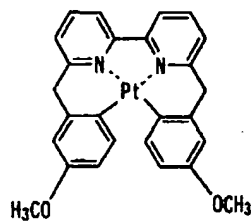
化合物(47)

30



化合物(48)

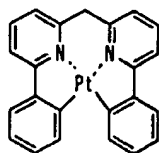
40



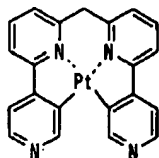
【 0 1 9 2 】

【化 2 6】

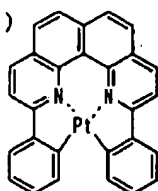
化合物(49)



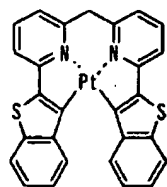
化合物(50)



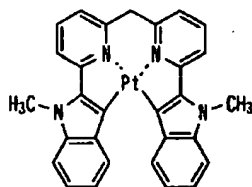
化合物(51)



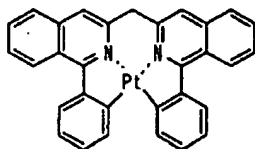
化合物(52)



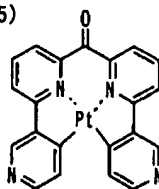
化合物(53)



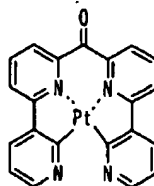
化合物(54)



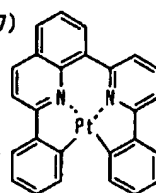
化合物(55)



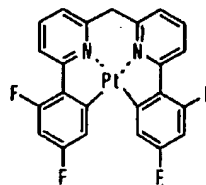
化合物(56)



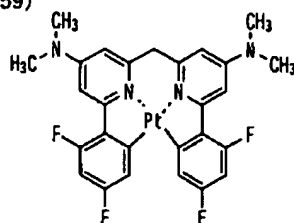
化合物(57)



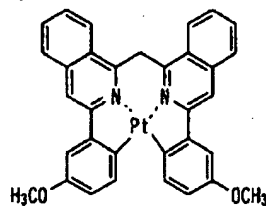
化合物(58)



化合物(59)



化合物(60)



10

20

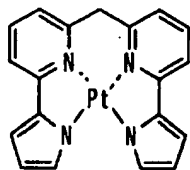
30

40

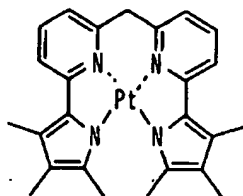
【0193】

【化 2 7】

化合物(61)

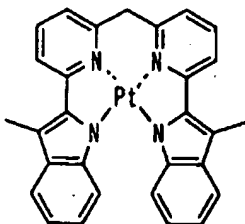


化合物(63)

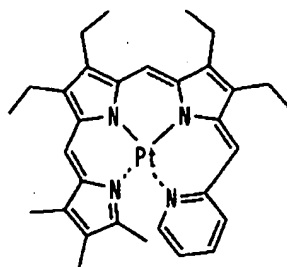


10

化合物(62)

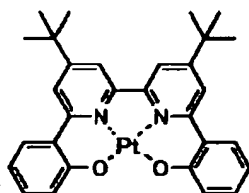


化合物(64)



20

化合物(65)

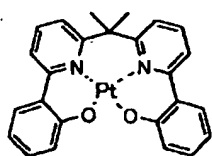


【 0 1 9 4 】

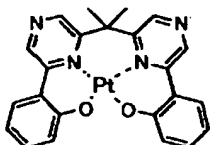
30

【化 28】

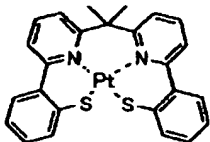
化合物 (66)



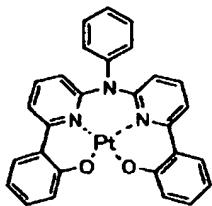
化合物 (67)



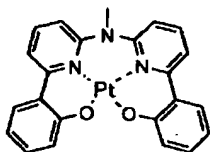
化合物 (68)



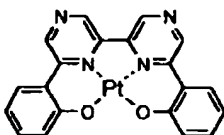
化合物 (69)



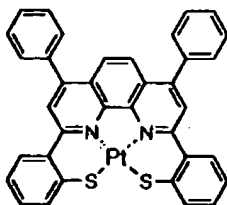
化合物 (70)



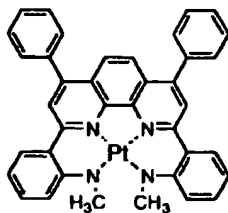
化合物 (71)



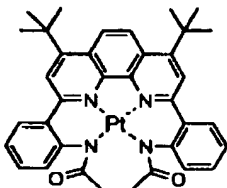
化合物 (72)



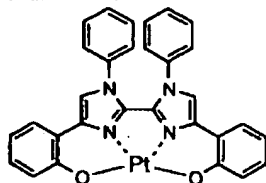
化合物 (73)



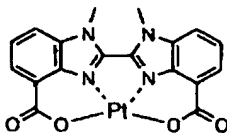
化合物 (74)



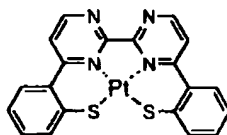
化合物 (75)



化合物 (76)



化合物 (77)



【0195】

10

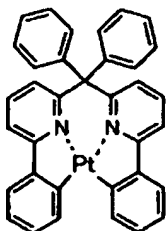
20

30

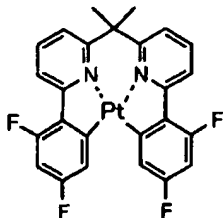
40

【化 2 9】

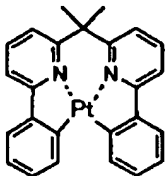
化合物 (78)



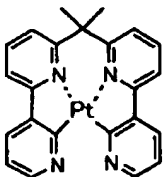
化合物 (83)



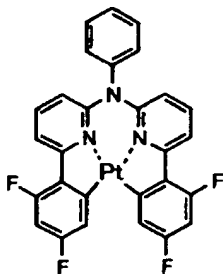
化合物 (79)



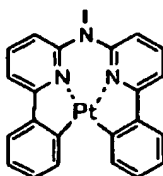
化合物 (84)



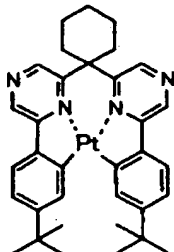
化合物 (80)



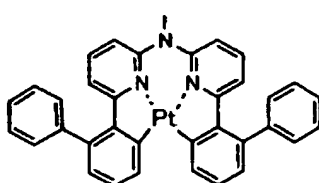
化合物 (85)



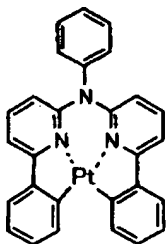
化合物 (81)



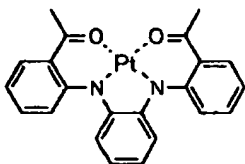
化合物 (86)



化合物 (82)



化合物 (87)



【0196】

10

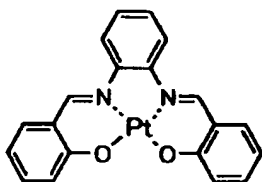
20

30

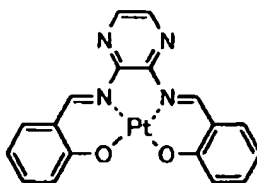
40

【化 3 0】

化合物 (88)

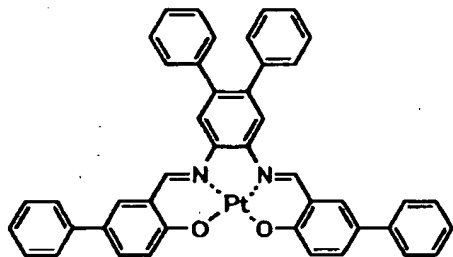


化合物 (93)

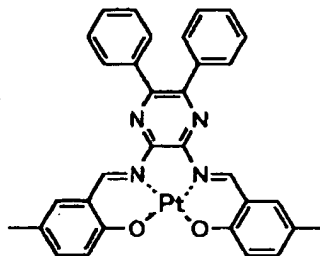


10

化合物 (89)

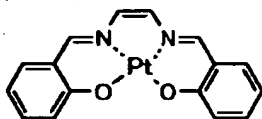


化合物 (94)

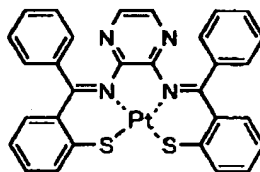


20

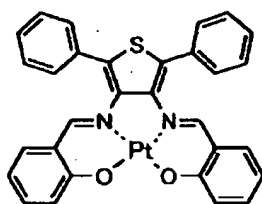
化合物 (90)



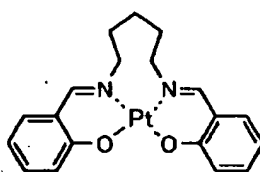
化合物 (95)



化合物 (91)

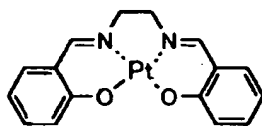


化合物 (96)

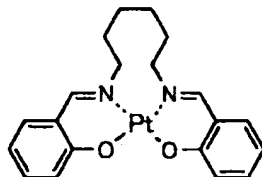


30

化合物 (92)



化合物 (97)

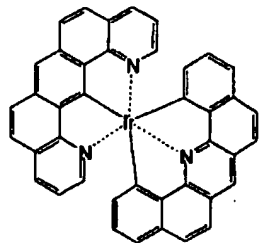


40

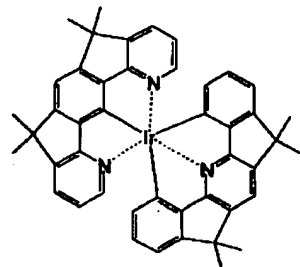
【0197】

【化 3 1】

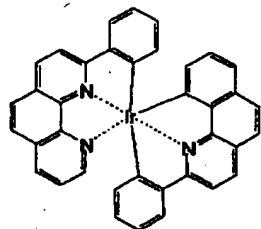
化合物 (98)



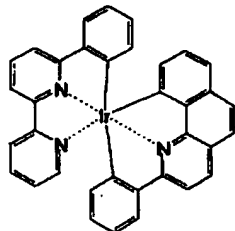
化合物 (99)



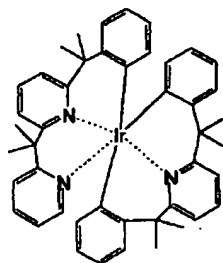
化合物 (100)



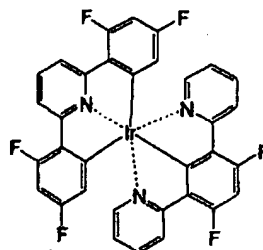
化合物 (101)



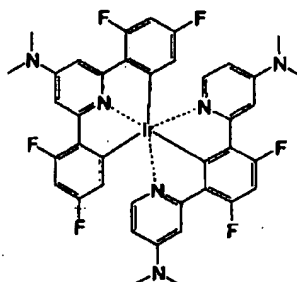
化合物 (102)



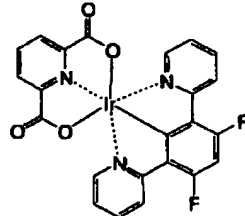
化合物 (103)



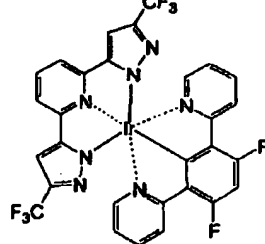
化合物 (104)



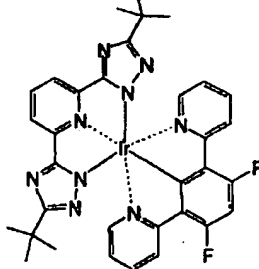
化合物 (105)



化合物 (106)



化合物 (107)



【 0 1 9 8 】

10

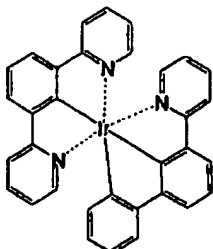
20

30

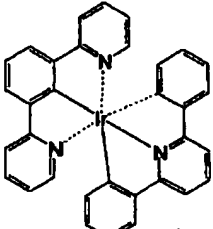
40

【化 3 2】

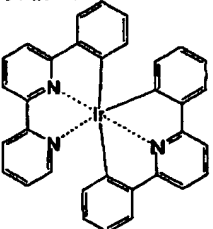
化合物 (108)



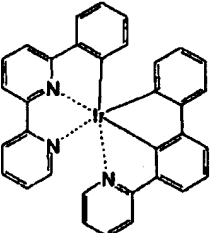
化合物 (109)



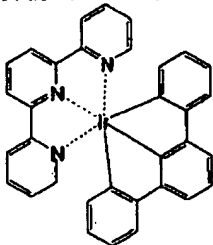
化合物 (110)



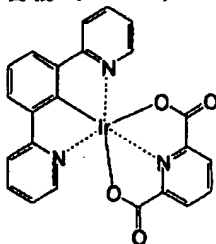
化合物 (111)



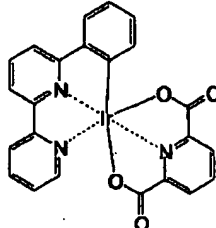
化合物 (112)



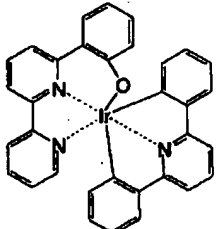
化合物 (113)



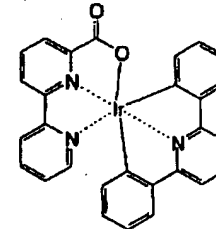
化合物 (114)



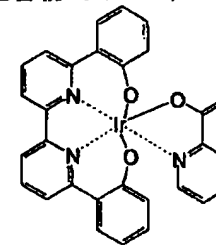
化合物 (115)



化合物 (116)



化合物 (117)



【0199】

10

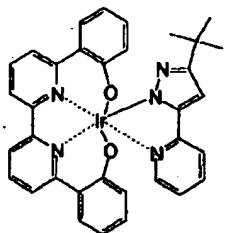
20

30

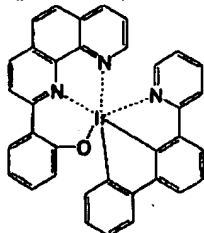
40

【化 3 3】

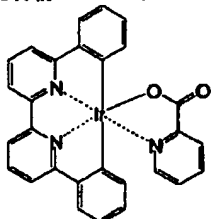
化合物 (118)



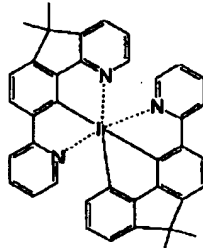
化合物 (123)



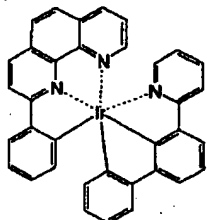
化合物 (119)



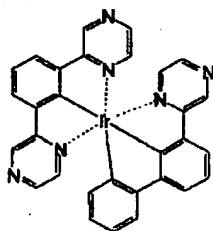
化合物 (124)



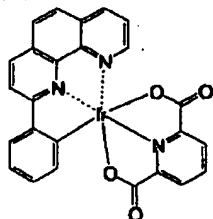
化合物 (120)



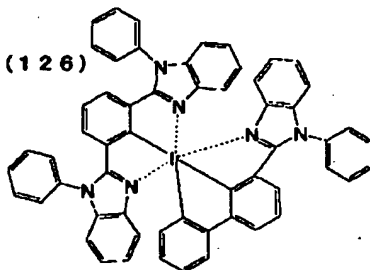
化合物 (125)



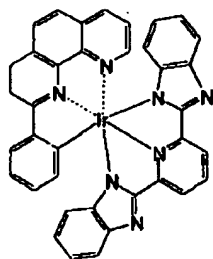
化合物 (121)



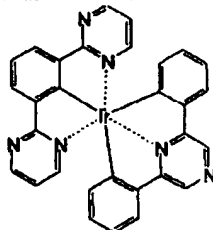
化合物 (126)



化合物 (122)



化合物 (127)



【0200】

10

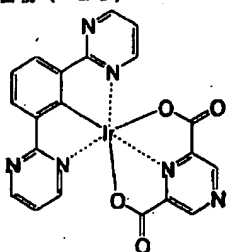
20

30

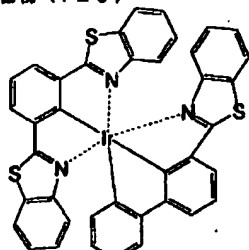
40

【化 3 4】

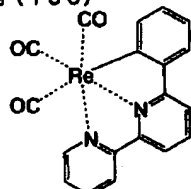
化合物 (128)



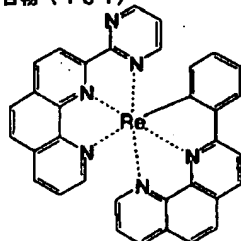
化合物 (129)



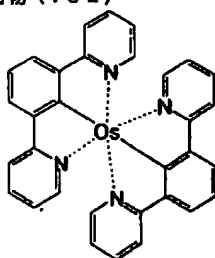
化合物 (130)



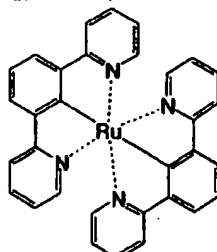
化合物 (131)



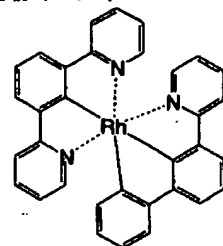
化合物 (132)



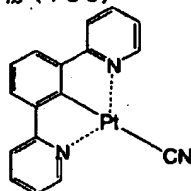
化合物 (133)



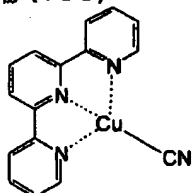
化合物 (134)



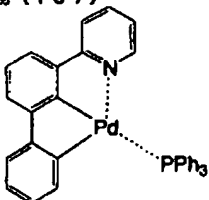
化合物 (135)



化合物 (136)



化合物 (137)



【0201】

10

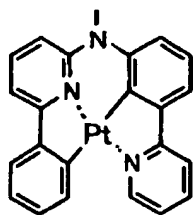
20

30

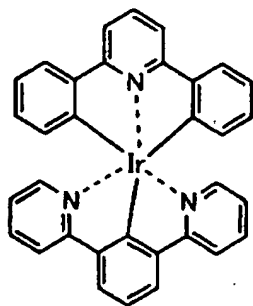
40

【化 3 5】

化合物 (138)

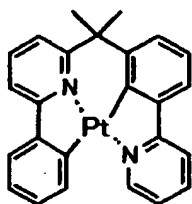


化合物 (141)

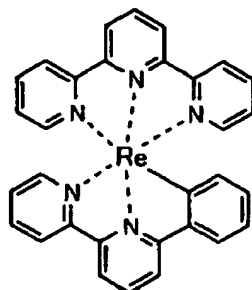


10

化合物 (139)

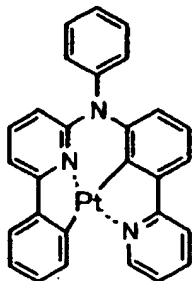


化合物 (142)

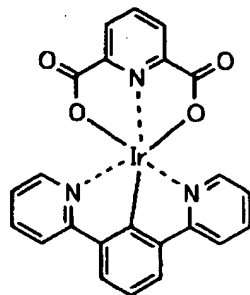


20

化合物 (140)



化合物 (143)



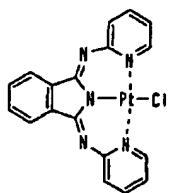
30

【 0 2 0 2 】

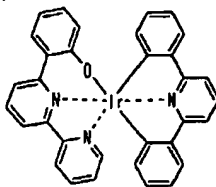
40

【化 3 6】

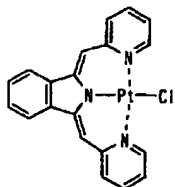
化合物(144)



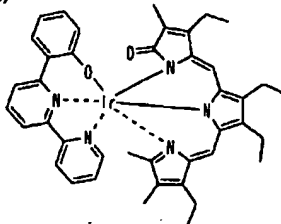
化合物(147)



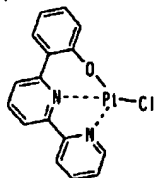
化合物(145)



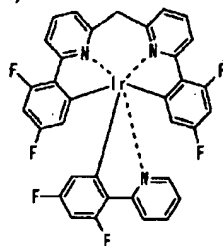
化合物(148)



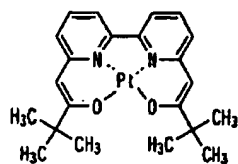
化合物(146)



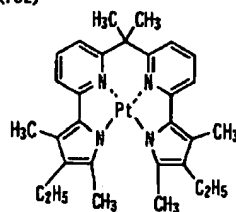
化合物(149)



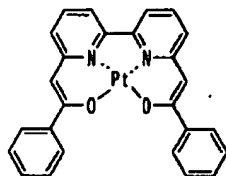
化合物(150)



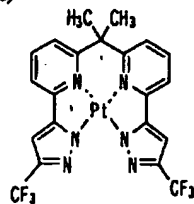
化合物(152)



化合物(151)



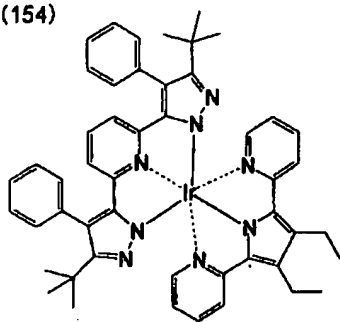
化合物(153)



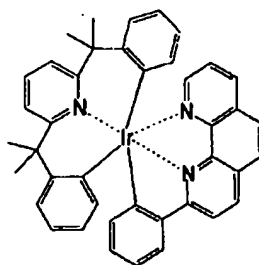
【 0 2 0 3 】

【化 3 7】

化合物(154)

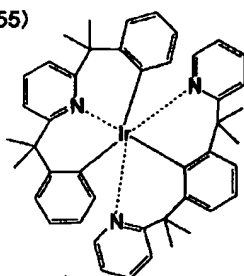


化合物(158)

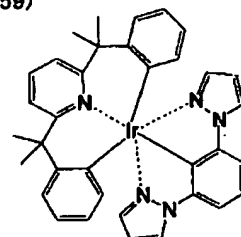


10

化合物(155)

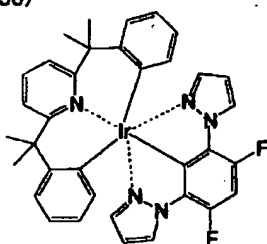


化合物(159)

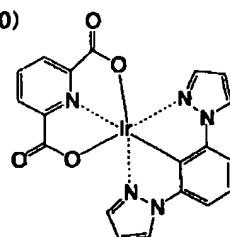


20

化合物(156)

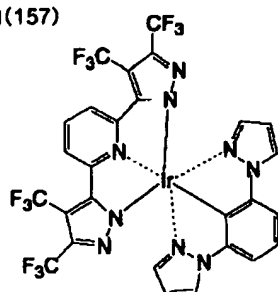


化合物(160)

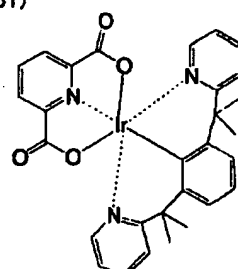


30

化合物(157)



化合物(161)

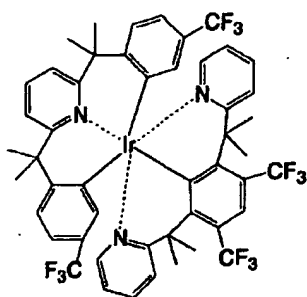


40

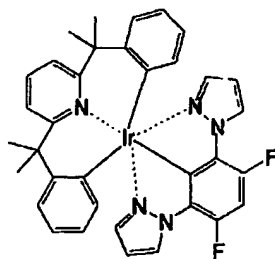
【 0 2 0 4 】

【化 3 8】

化合物(162)

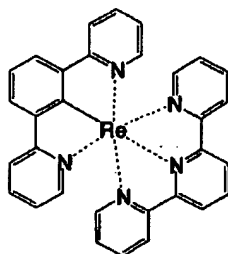


化合物(166)

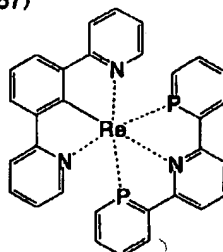


10

化合物(163)

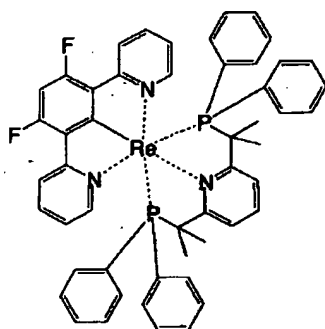


化合物(167)

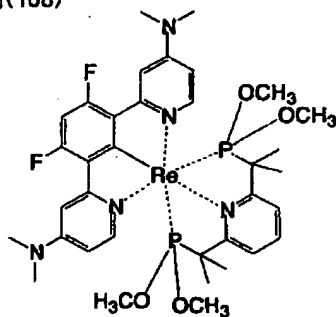


20

化合物(164)

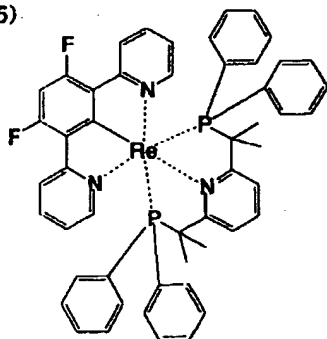


化合物(168)

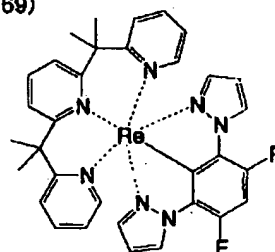


30

化合物(165)



化合物(169)

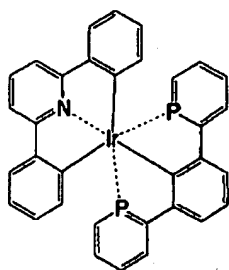


40

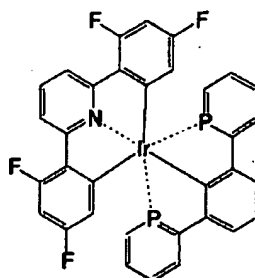
【 0 2 0 5 】

【化 3 9】

化合物 (170)

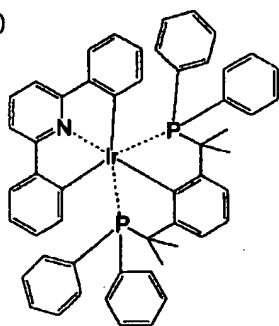


化合物 (174)

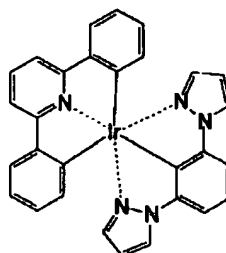


10

化合物 (171)

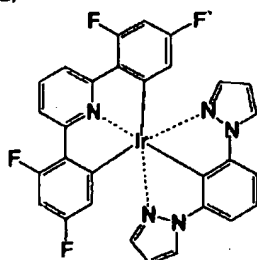


化合物 (175)

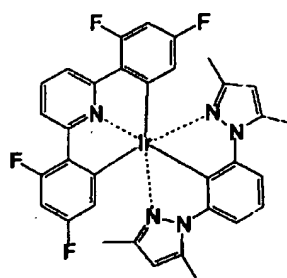


20

化合物 (172)

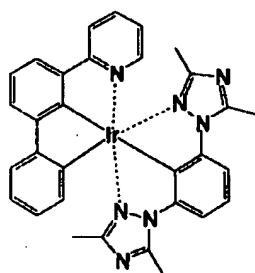


化合物 (176)

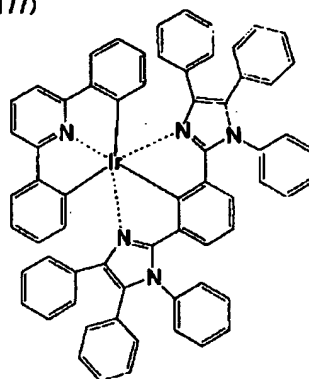


30

化合物 (173)



化合物 (177)

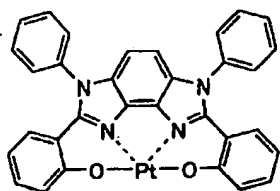


40

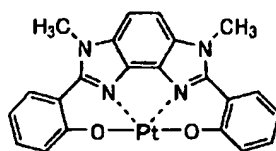
【 0 2 0 6 】

【化 4 0】

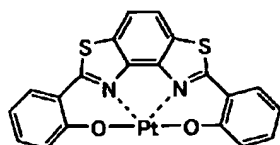
化合物 (178)



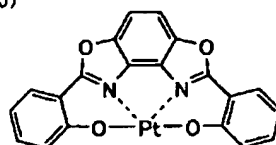
化合物 (184)



化合物 (179)

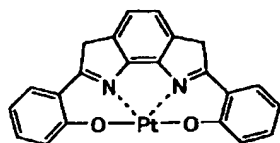


化合物 (185)

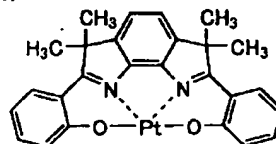


10

化合物 (180)

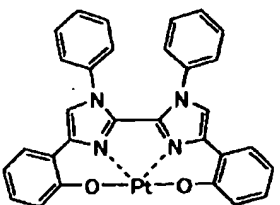


化合物 (186)

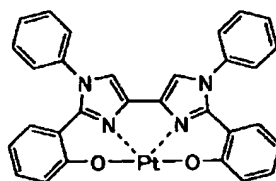


20

化合物 (181)

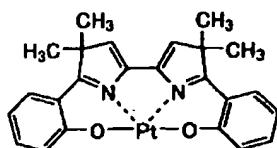


化合物 (187)

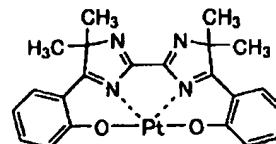


30

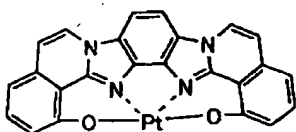
化合物 (182)



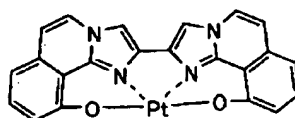
化合物 (188)



化合物 (183)



化合物 (189)

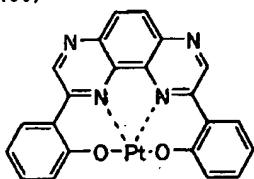


40

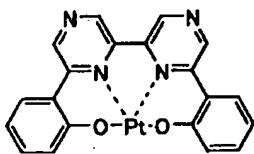
【 0 2 0 7】

【化 4 1】

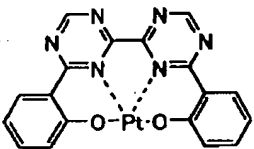
化合物 (190)



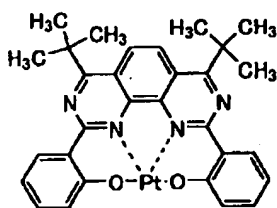
化合物 (191)



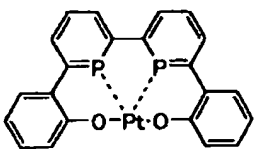
化合物 (192)



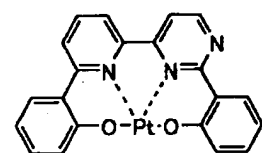
化合物 (193)



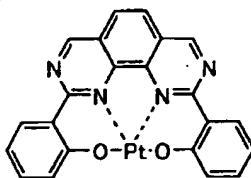
化合物 (194)



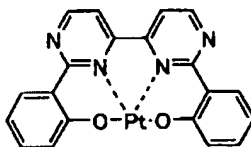
化合物 (195)



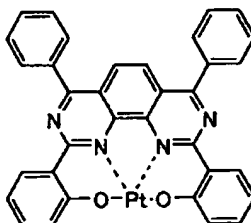
化合物 (196)



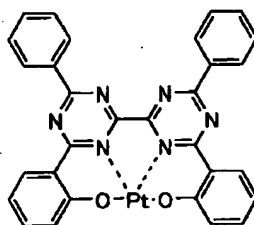
化合物 (197)



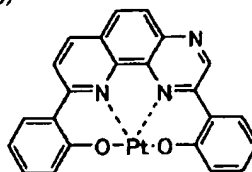
化合物 (198)



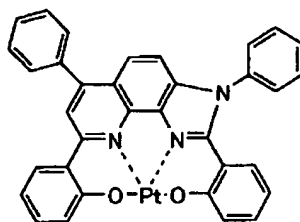
化合物 (199)



化合物 (200)



化合物 (201)



【 0 2 0 8 】

10

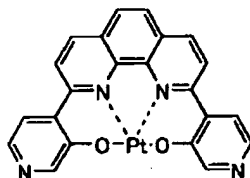
20

30

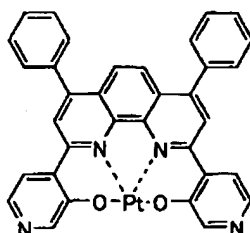
40

【化 4 2】

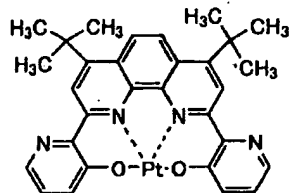
化合物 (202)



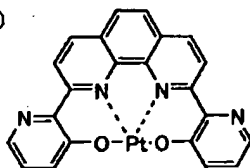
化合物 (207)



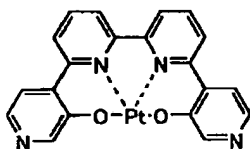
化合物 (208)



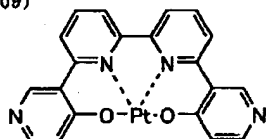
化合物 (203)



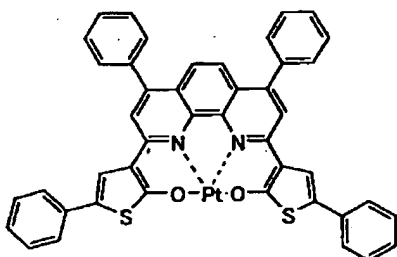
化合物 (204)



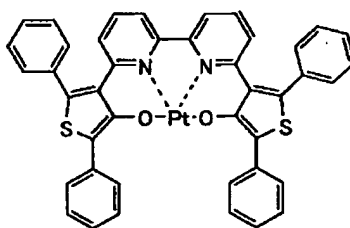
化合物 (209)



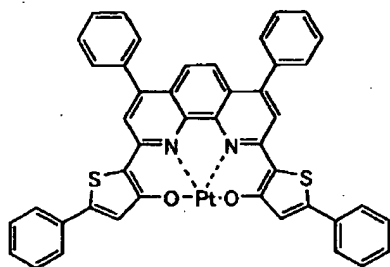
化合物 (205)



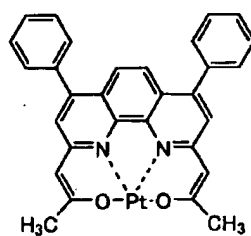
化合物 (210)



化合物 (206)

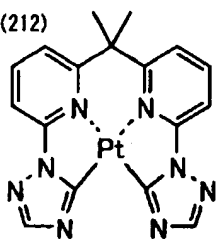


化合物 (211)

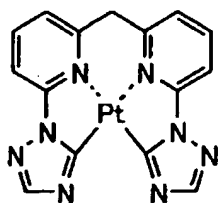


【化 4 3】

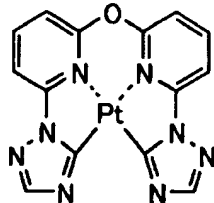
化合物 (212)



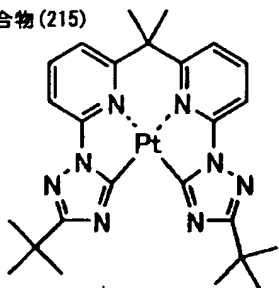
化合物 (213)



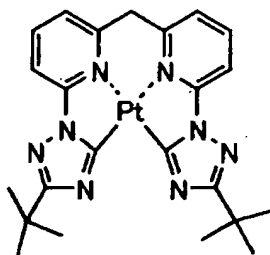
化合物 (214)



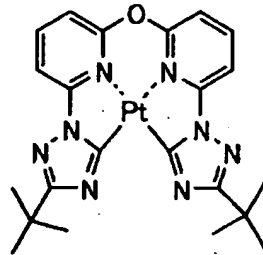
化合物 (215)



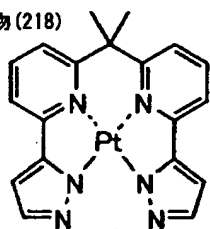
化合物 (216)



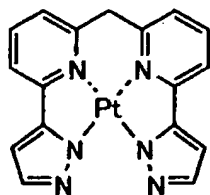
化合物 (217)



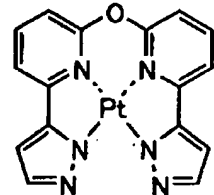
化合物 (218)



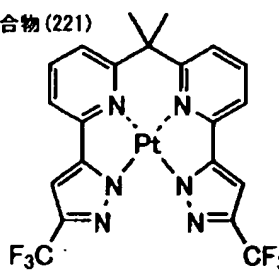
化合物 (219)



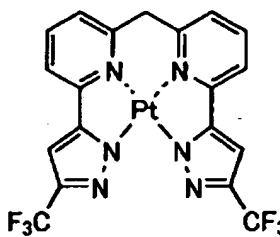
化合物 (220)



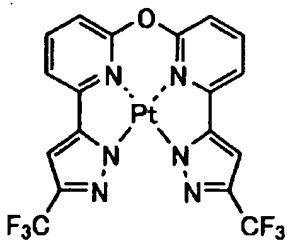
化合物 (221)



化合物 (222)



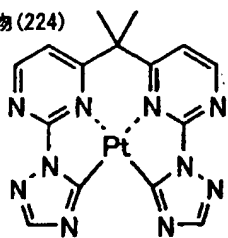
化合物 (223)



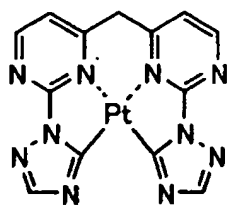
【 0 2 1 0 】

【化 4 4】

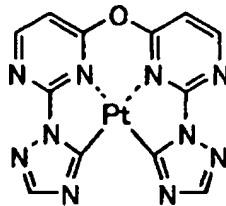
化合物 (224)



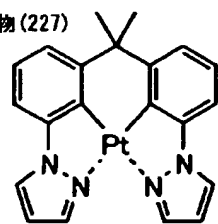
化合物 (225)



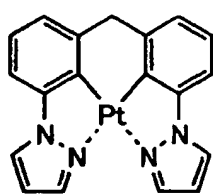
化合物 (226)



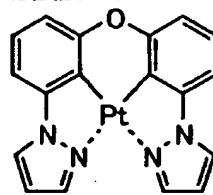
化合物 (227)



化合物 (228)

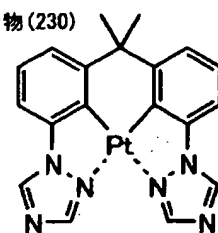


化合物 (229)

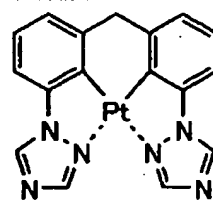


10

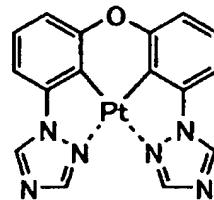
化合物 (230)



化合物 (231)



化合物 (232)

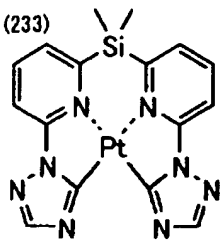


20

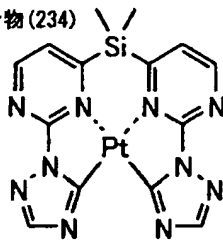
【 0 2 1 1 】

【化 4 5】

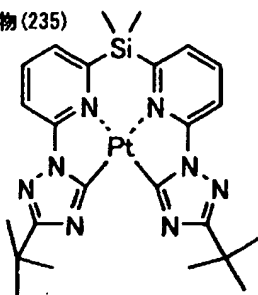
化合物 (233)



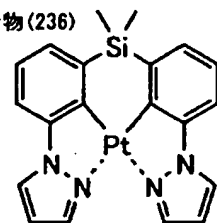
化合物 (234)



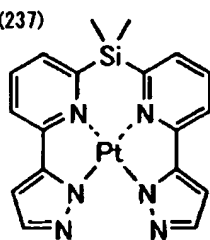
化合物 (235)



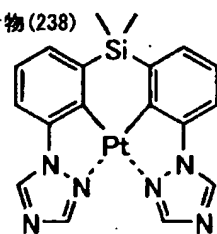
化合物 (236)



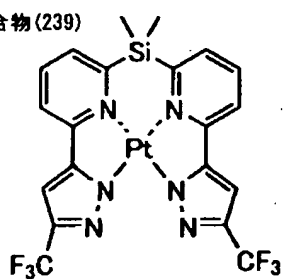
化合物 (237)



化合物 (238)



化合物 (239)



【 0 2 1 2 】

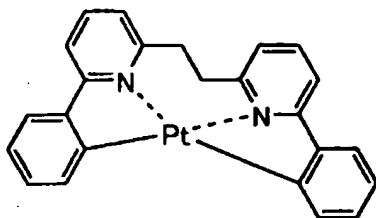
10

20

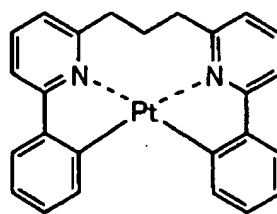
30

【化 4 6】

化合物 (240)

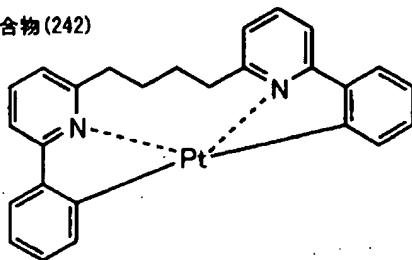


化合物 (241)



10

化合物 (242)



20

【0 2 1 3】

(本発明における金属錯体の合成方法)

本発明における金属錯体〔前記一般式 (I)、(1)、(1-A)、(2)、(3)、(3-A)、(3-B)、(3-C)、(4)、(4-A)、(5)、(5-A)、及び(5-B)、並びに前記一般式 (I I)、(X 2)、及び(X 3)で表される化合物〕は、種々の手法で合成できる。

例えば、配位子、またはその解離体と金属化合物を溶媒（例えば、ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒、アミド系溶媒、スルホン系溶媒、スルホキサイド系溶媒、水などが挙げられる）の存在下、もしくは、溶媒非存在下、塩基の存在下（無機、有機の種々の塩基、例えば、ナトリウムメトキシド、*t*-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウムなどが挙げられる）、もしくは、塩基非存在下、室温以下、もしくは加熱し（通常の加熱以外にもマイクロウェーブで加熱する手法も有効である）得ることができる。

30

【0 2 1 4】

本発明の金属錯体を合成する際の反応時間は反応原料の活性により異なり、特に限定されないが、1分以上5日以下が好ましく、5分以上3日以下がより好ましく、10分以上1日以下がさらに好ましい。

【0 2 1 5】

本発明の金属錯体合成の反応温度は反応の活性により異なり、特に限定されないが、0℃以上300℃以下が好ましく、5℃以上250℃以下がより好ましく、10℃以上200℃以下がさらに好ましい。

40

【0 2 1 6】

本発明の金属錯体は、目的とする錯体の部分構造を形成している配位子を適宜選択することで、前記一般式 (I)、(1)、(1-A)、(2)、(3)、(3-A)、(3-B)、(3-C)、(4)、(4-A)、(5)、(5-A)、及び(5-B)、並びに前記一般式 (I I)、(X 2)、及び(X 3)で表される化合物で表される化合物は合成できる。

例えば、一般式 (1-A)で表される化合物を合成する際は、6, 6'-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子またはその誘導体（例えば、2, 9-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-1, 10-フェナントロリン配位子、2, 9-ビス(

50

2-ヒドロキシフェニル)-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン配位子、6, 6'-ビス(2-ヒドロキシ-5-tert-ブチルフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子など)などを、金属化合物に対し、好ましくは0.1当量~10当量、より好ましくは0.3当量~6当量、さらに好ましくは0.5当量~4当量加えて合成できる。一般式(1-A)で表される化合物の合成方法において、反応溶媒、反応時間、反応温度の各々は、上記本発明の金属錯体の合成方法で述べた事項と同様である。

【0217】

6, 6'-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子の誘導体は種々の公知の方法を用いて合成することができる。

例えば、2, 2'-ビピリジル誘導体(例えば、1, 10-フェナントロリンなど)とアニソール誘導体(例えば、4-フルオロアニソールなど)をJournal of Organic Chemistry, 741, 11, (1946)に記載の方法で反応させることにより合成することができる。また、ハロゲン化された2, 2'-ビピリジル誘導体(例えば、2, 9-ジプロモ-1, 10-フェナントロリンなど)と2-メトキシフェニルボロン酸誘導体など(例えば、2-メトキシ-5-フルオロフェニルボロン酸など)を出発物質として鈴木カップリング反応を行った後、メチル基を脱保護する(Journal of Organic Chemistry, 741, 11, (1946)に記載の方法、ピリジン塩酸塩中で加熱するなどの方法を用いる)ことにより合成することができる。また、2, 2'-ビピリジルボロン酸誘導体(例えば6, 6'-ビス(4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロリル)-2, 2'-ビピリジルなど)とハロゲン化されたアニソール誘導体(例えば2-プロモアニソールなど)を出発物質として鈴木カップリング反応を行った後、メチル基を脱保護する(Journal of Organic Chemistry, 741, 11, (1946)に記載の方法、または、ピリジン塩酸塩中で加熱するなどの方法を用いる)ことによって合成することができる。

【0218】

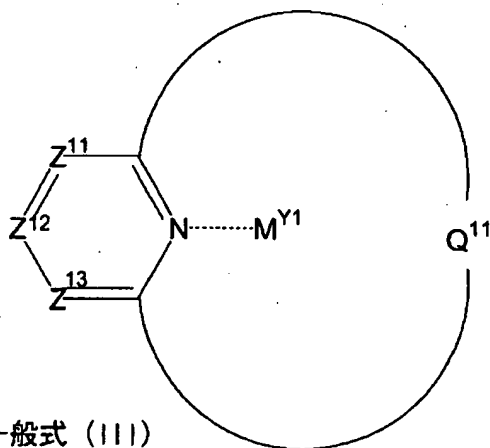
本発明における金属錯体の配位子が前述の通り環状配位子である場合、該金属錯体は、下記一般式(III)で表される化合物であることが好ましい。

【0219】

以下、下記一般式(III)で表される化合物について説明する。

【0220】

【化47】



【0221】

一般式(III)中、Q¹¹は含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、Z¹¹、Z¹²、Z¹³はそれぞれ置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表し、Mⁿ¹は更に配位子を有しても良い金属イオンを表す。

【0222】

一般式 (III) 中、 Q^{11} は、 Q^{11} が結合する炭素原子 2 つとこれらの炭素原子に直接結合している窒素原子とを含んで、含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表す。 Q^{11} で形成される含窒素ヘテロ環の環員数としては特に限定されないが、環員数 12 ~ 20 が好ましく、環員数 14 ~ 16 がより好ましく、環員数 16 がさらに好ましい。

【0223】

Z^{11} 、 Z^{12} 、及び Z^{13} はそれぞれ独立に、置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表す。 Z^{11} 、 Z^{12} 、及び Z^{13} の組合せとしては、 Z^{11} 、 Z^{12} 、及び Z^{13} の少なくとも 1 つが窒素原子であることが好ましい。

【0224】

炭素原子上の置換基としては、例えば、アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、i s o - プロピル、t e r t - プロピル、n - オクチル、n - デシル、n - ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2 - プテニル、3 - ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。）、

【0225】

アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、p - メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリールオキシ基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。）、

【0226】

アシル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。）、アリールオキシカルボニル基（好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。）、アシルオキシ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。）、アシルアミノ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、

【0227】

アルコキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、アリールオキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、スルホニルアミノ基（好ましくは炭素数 1 ~ 3

0、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数0～30、より好ましくは炭素数0～20、特に好ましくは炭素数0～12であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、

【0228】

カルバモイル基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、

【0229】

スルホニル基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、

【0230】

シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3～40、より好ましくは炭素数3～30、特に好ましくは炭素数3～24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数3～40、より好ましくは炭素数3～30、特に好ましくは炭素数3～24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

これらの置換基の中でも、炭素原子上の置換基としては、アルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ハロゲン原子が好ましく、より好ましくはアリール基、ハロゲン原子であり、さらに好ましくはフェニル基、フッ素原子である。

【0231】

窒素原子上の置換基としては、前記炭素原子上の置換基として例示した置換基が挙げられ、好ましい範囲も同じである。

【0232】

一般式(III)中、 M^{Y1} は配位子を更に有してもよい金属イオンを表し、他に配位子を有さない金属イオンがより好ましい。

【0233】

M^{Y1} で表される金属イオンとしては特に限定されないが、2価または3価の金属イオン

10

20

30

40

50

が好ましい。2価または3価の金属イオンとしては、コバルトイオン、マグネシウムイオン、亜鉛イオン、パラジウムイオン、ニッケルイオン、銅イオン、白金イオン、鉛イオン、アルミニウムイオン、イリジウムイオン、ユーロピウムイオンが好ましく、コバルトイオン、マグネシウムイオン、亜鉛イオン、パラジウムイオン、ニッケルイオン、銅イオン、白金イオン、鉛イオンがより好ましく、銅イオン、白金イオンがさらに好ましく、白金イオンが特に好ましい。 M^{Y1} は、 Q^{11} に含まれる原子と結合していても結合していなくてもよく、結合している方が好ましい。

【0234】

M^{Y1} が、さらに有していてもよい配位子としては、特に限定されないが、単座、もしくは、2座の配位子が好ましく、2座の配位子がより好ましい。配位する原子としては、特に限定されないが、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、炭素原子、りん原子が好ましく、酸素原子、窒素原子、炭素原子がより好ましく、酸素原子、窒素原子がさらに好ましい。

【0235】

前記一般式(III)で表される化合物の好ましい例は、下記一般式(a)～(j)で表される化合物、又はそれらの互変異性体である。

一般式(III)で表される化合物としては、一般式(a)及び一般式(b)で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式(b)で表される化合物またはその互変異性体がより好ましい。

また、一般式(III)で表される化合物としては、一般式(c)または一般式(g)で表される化合物も好ましい。

一般式(c)で表される化合物としては、一般式(d)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(e)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(f)で表される化合物またはその互変異性体が好ましく、一般式(d)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(e)で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式(d)で表される化合物またはその互変異性体がさらに好ましい。

【0236】

一般式(g)で表される化合物としては、一般式(h)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(i)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(j)で表される化合物またはその互変異性体が好ましく、一般式(h)で表される化合物またはその互変異性体、一般式(i)で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式(h)で表される化合物またはその互変異性体がさらに好ましい。

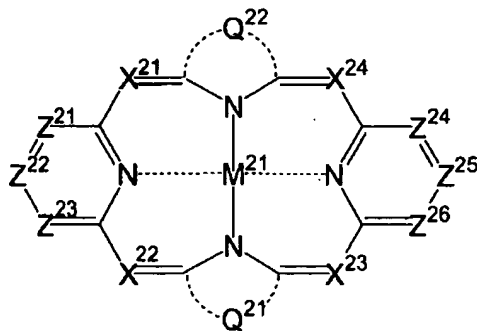
【0237】

以下、一般式(a)～(j)で表される化合物について詳細に説明する。

【0238】

【化48】

一般式(a)



【0239】

一般式(a)で表される化合物について説明する。

一般式 (a) 中、 Z^{21} 、 Z^{22} 、 Z^{23} 、 Z^{24} 、 Z^{25} 、 Z^{26} 、 M^{21} はそれぞれ対応する前記一般式 (I I I) における Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{13} 、 Z^{11} 、 Z^{12} 、 Z^{13} 、 M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0240】

Q^{21} 、 Q^{22} はそれぞれ含窒素ヘテロ環を形成する基を表す。 Q^{21} 、 Q^{22} で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、ピロール環、イミダゾール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体（例えばベンズピロール）、及び、これらの互変異性体（例えば、後述の一般式 (b) において、 R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、 R^{46} が置換している含窒素5員環はピロールの互変異性体と定義する）が好ましく、ピロール環及びピロール環を含む縮環体（例えば、ベンズピロール）がより好ましい。

10

【0241】

X^{21} 、 X^{22} 、 X^{23} 、 X^{24} は、それぞれ独立に、置換または無置換の、炭素原子又は窒素原子を表し、無置換の、炭素原子、窒素原子が好ましく、窒素原子がより好ましい。

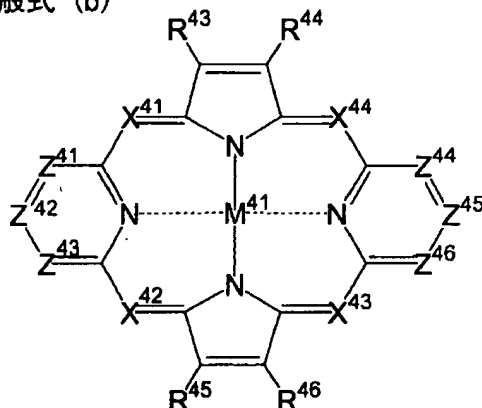
【0242】

一般式 (b) で表される化合物について説明する。

【0243】

【化49】

一般式 (b)



20

30

【0244】

一般式 (b) 中、 Z^{41} 、 Z^{42} 、 Z^{43} 、 Z^{44} 、 Z^{45} 、 Z^{46} 、 X^{41} 、 X^{42} 、 X^{43} 、 X^{44} 、 M^{41} は前記一般式 (a) における Z^{21} 、 Z^{22} 、 Z^{23} 、 Z^{24} 、 Z^{25} 、 Z^{26} 、 X^{21} 、 X^{22} 、 X^{23} 、 X^{24} 、 M^{21} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0245】

R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、 R^{46} はそれぞれ独立に水素原子、または前記一般式 (III) における Z^{11} 又は Z^{12} 上の置換基として例示したアルキル基、アリール基、 R^{43} と R^{44} または R^{45} と R^{46} が結合して環構造（例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基が好ましく、アルキル基、アリール基、 R^{43} と R^{44} または R^{45} と R^{46} が結合して環構造（例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基がより好ましく、 R^{43} と R^{44} または R^{45} と R^{46} が結合して環構造（例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基がさらに好ましい。

40

【0246】

R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、 R^{46} はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。置換基としては前記一般式 (III) における Z^{11} 又は Z^{12} について炭素原子上の置換基で説明した基が挙げられる。

【0247】

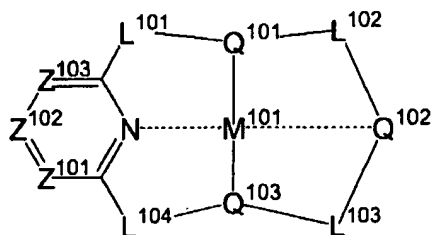
一般式 (c) で表される化合物について説明する。

【0248】

50

【化50】

一般式 (c)



10

【0249】

一般式 (c) 中、 Z^{101} 、 Z^{102} 、 Z^{103} はそれぞれ独立に置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表す。 Z^{101} 、 Z^{102} 、 Z^{103} の少なくとも一つが窒素原子であることが好ましい。

【0250】

L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} はそれぞれ独立に単結合または連結基を表す。連結としては特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、含窒素ヘテロ環連結基、酸素原子連結基、アミノ連結基、イミノ連結基、カルボニル連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

20

【0251】

L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} はそれぞれ独立に単結合、アルキレン基、アルケニレン基、アミノ連結基、イミノ連結基が好ましく、単結合、アルキレン連結基、アルケニレン連結基、イミノ連結基がより好ましく、単結合、アルキレン連結基がさらに好ましい。

【0252】

Q^{101} 、 Q^{103} はそれぞれ独立に M^{101} に炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基、りん原子で配位する基、酸素原子で配位する基、または、硫黄原子で配位する基を表す。

【0253】

M^{101} に炭素原子で配位する基としては、炭素原子で配位するアリール基、炭素原子で配位する5員環ヘテロアリール基、炭素原子で配位する6員環ヘテロアリール基が好ましく、炭素原子で配位するアリール基、炭素原子で配位する含窒素5員環ヘテロアリール基、炭素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基がより好ましく、炭素原子で配位するアリール基がさらに好ましい。

30

【0254】

M^{101} に窒素原子で配位する基としては、窒素原子で配位する含窒素5員環ヘテロアリール基、窒素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基が好ましく、窒素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基がより好ましい。

【0255】

M^{101} にりん原子で配位する基としては、りん原子で配位するアルキルホスフィン基、りん原子で配位するアリールホスフィン基、りん原子で配位するアルコキシホスフィン基、りん原子で配位するアリールオキシホスフィン基、りん原子で配位するヘテロアリールオキシホスフィン基、りん原子で配位するホスフィニン基、りん原子で配位するホスホール基が好ましく、りん原子で配位するアルキルホスフィン基、りん原子で配位するアリールホスフィン基がより好ましい。

40

【0256】

M^{101} に酸素原子で配位する基としては、オキシ基、酸素原子で配位するカルボニル基が好ましく、オキシ基がさらに好ましい。

【0257】

50

M^{101} に硫黄原子で配位する基としては、スルフィド基、チオフェン基、チアゾール基が好ましく、チオフェン基がより好ましい。

【0258】

Q^{101} 、 Q^{103} は M^{101} に炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基、酸素原子で配位する基が好ましく、炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基がより好ましく、酸素原子で配位する基がさらに好ましい。

【0259】

Q^{102} は M^{101} に窒素原子で配位する基、りん原子で配位する基、酸素原子で配位する基、または、硫黄原子で配位する基を表し、窒素原子で配位する基がより好ましい。

【0260】

M^{101} は前記一般式(I)における M^{11} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

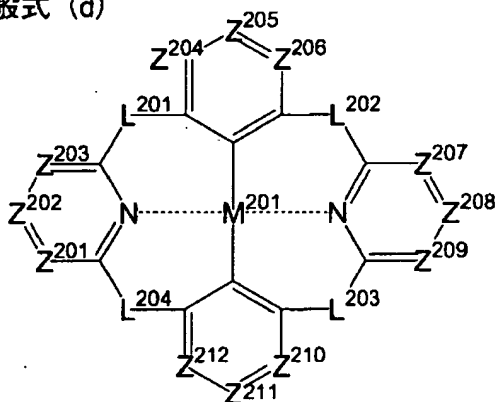
【0261】

一般式(d)で表される化合物について説明する。

【0262】

【化51】

一般式(d)



【0263】

一般式(d)中、 Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 L^{201} 、 L^{202} 、 L^{203} 、 L^{204} 、 M^{201} はそれぞれ対応する前記一般式(c)における Z^{101} 、 Z^{102} 、 Z^{103} 、 Z^{104} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。 Z^{204} 、 Z^{205} 、 Z^{206} 、 Z^{210} 、 Z^{211} 、 Z^{212} はそれぞれ置換または無置換の炭素原子又は窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。

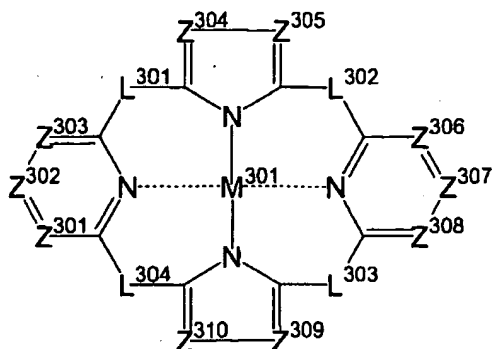
【0264】

一般式(e)で表される化合物について説明する。

【0265】

【化 5 2】

一般式(e)



10

【0 2 6 6】

一般式 (e) 中、 Z^{301} 、 Z^{302} 、 Z^{303} 、 Z^{304} 、 Z^{305} 、 Z^{306} 、 Z^{307} 、 Z^{308} 、 Z^{309} 、 Z^{310} 、 L^{301} 、 L^{302} 、 L^{303} 、 L^{304} 、 M^{301} は、それぞれ対応する前記一般式 (d)、(c) における Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{204} 、 Z^{206} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 Z^{210} 、 Z^{212} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0 2 6 7】

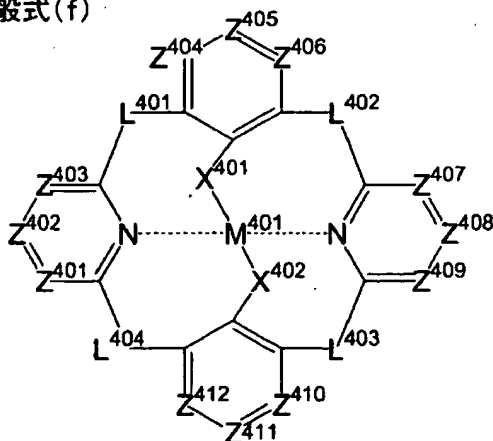
一般式 (f) で表される化合物について説明する。

20

【0 2 6 8】

【化 5 3】

一般式(f)



30

【0 2 6 9】

一般式 (f) 中、 Z^{401} 、 Z^{402} 、 Z^{403} 、 Z^{404} 、 Z^{405} 、 Z^{406} 、 Z^{407} 、 Z^{408} 、 Z^{409} 、 Z^{410} 、 Z^{411} 、 Z^{412} 、 L^{401} 、 L^{402} 、 L^{403} 、 L^{404} 、 M^{401} は、それぞれ対応する前記一般式 (d)、(c) における Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{204} 、 Z^{205} 、 Z^{206} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 Z^{210} 、 Z^{211} 、 Z^{212} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

40

X^{401} 、 X^{402} はそれぞれ独立に酸素原子、置換又は無置換の窒素原子、硫黄原子を表し、酸素原子、置換窒素原子が好ましく、酸素原子がより好ましい。

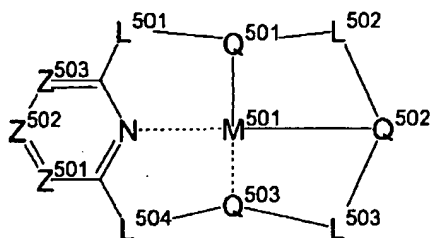
【0 2 7 0】

一般式 (g) で表される化合物について説明する

【0 2 7 1】

【化 5 4】

一般式(g)



10

【0 2 7 2】

一般式 (g) 中、 Z^{501} 、 Z^{502} 、 Z^{503} 、 L^{501} 、 L^{502} 、 L^{503} 、 L^{504} 、 Q^{501} 、 Q^{502} 、 Q^{503} 、 M^{501} は、それぞれ対応する前記一般式 (c) における Z^{101} 、 Z^{102} 、 Z^{103} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 Q^{101} 、 Q^{103} 、 Q^{102} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0 2 7 3】

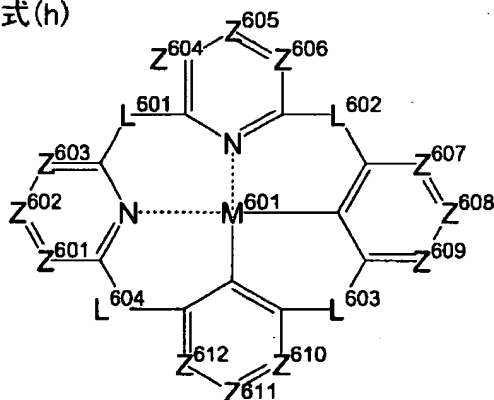
一般式 (h) で表される化合物について説明する。

【0 2 7 4】

20

【化 5 5】

一般式(h)



30

【0 2 7 5】

一般式 (h) 中、 Z^{601} 、 Z^{602} 、 Z^{603} 、 Z^{604} 、 Z^{605} 、 Z^{606} 、 Z^{607} 、 Z^{608} 、 Z^{609} 、 Z^{610} 、 Z^{611} 、 Z^{612} 、 L^{601} 、 L^{602} 、 L^{603} 、 L^{604} 、 M^{601} は、それぞれ対応する前記一般式 (d)、(c) における Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 Z^{204} 、 Z^{205} 、 Z^{206} 、 Z^{210} 、 Z^{211} 、 Z^{212} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

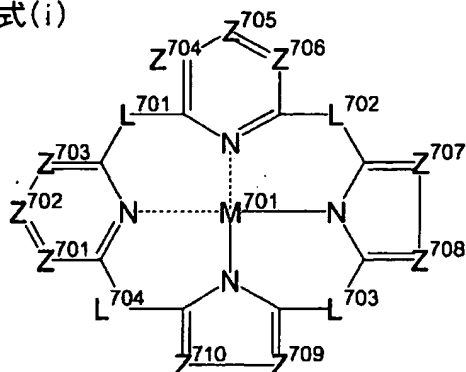
40

【0 2 7 6】

一般式 (i) で表される化合物について説明する。

【0 2 7 7】

一般式(i)

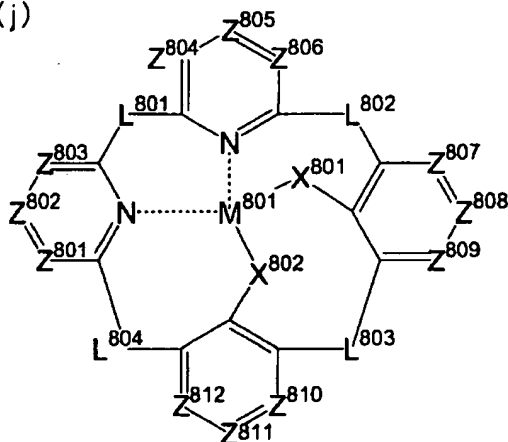


一般式 (i) 中、 Z^{701} 、 Z^{702} 、 Z^{703} 、 Z^{704} 、 Z^{705} 、 Z^{706} 、 Z^{707} 、 Z^{708} 、 Z^{709} 、 Z^{710} 、 L^{701} 、 L^{702} 、 L^{703} 、 L^{704} 、 M^{701} はそれぞれ対応する前記一般式 (d)、(c) における Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 Z^{204} 、 Z^{206} 、 Z^{210} 、 Z^{212} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 M^{101} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

一般式 (j) で表される化合物について説明する。

【化 5 7】

一般式(j)



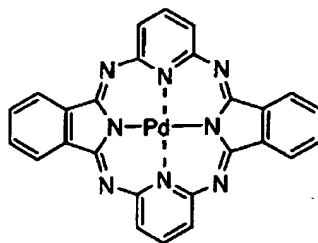
一般式 (j) 中、 Z^{801} 、 Z^{802} 、 Z^{803} 、 Z^{804} 、 Z^{805} 、 Z^{806} 、 Z^{807} 、 Z^{808} 、 Z^{809} 、 Z^{810} 、 Z^{811} 、 Z^{812} 、 L^{801} 、 L^{802} 、 L^{803} 、 L^{804} 、 M^{801} 、 X^{801} 、 X^{802} は、それぞれ対応する前記一般式 (d)、(c)、(f) における Z^{201} 、 Z^{202} 、 Z^{203} 、 Z^{207} 、 Z^{208} 、 Z^{209} 、 Z^{204} 、 Z^{205} 、 Z^{206} 、 Z^{210} 、 Z^{211} 、 Z^{212} 、 L^{101} 、 L^{102} 、 L^{103} 、 L^{104} 、 M^{101} 、 X^{401} 、 X^{402} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

一般式 (III) で表される化合物の具体例としては、特願 2004-88575 記載の化合物 (2) ~ 化合物 (8)、化合物 (15) ~ 化合物 (20)、化合物 (27) ~ 化合物 (32)、化合物 (36) ~ 化合物 (38)、化合物 (42) ~ 化合物 (44)、化合物 (50) ~ 化合物 (52)、及び、化合物 (57) ~ 化合物 (154) (以下に構造を示す。) が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【 0 2 8 3 】

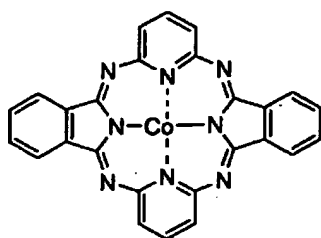
【化 5 8】

化合物(5)

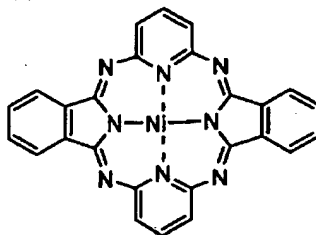


10

化合物(2)

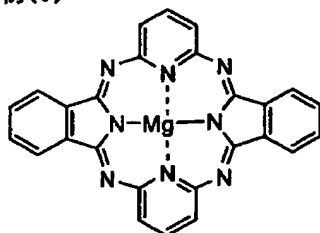


化合物(6)

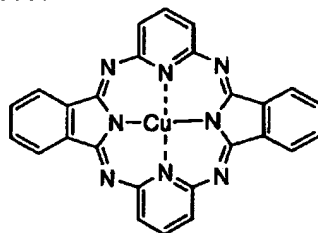


20

化合物(3)

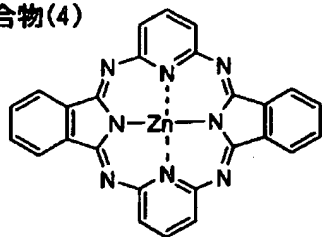


化合物(7)

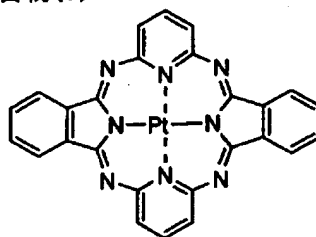


30

化合物(4)



化合物(8)

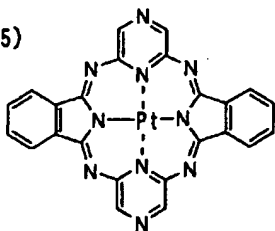


40

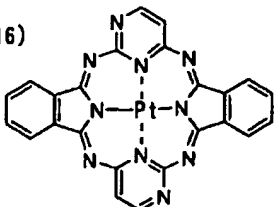
【 0 2 8 4】

【化 5 9】

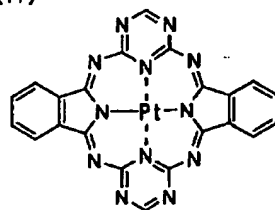
化合物(15)



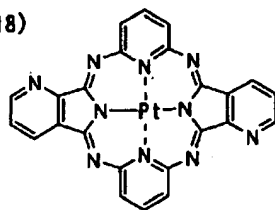
化合物(16)



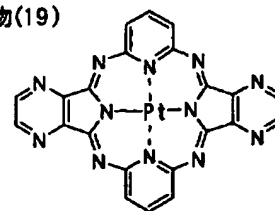
化合物(17)



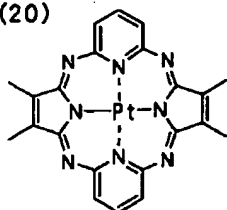
化合物(18)



化合物(19)



化合物(20)



【 0 2 8 5 】

10

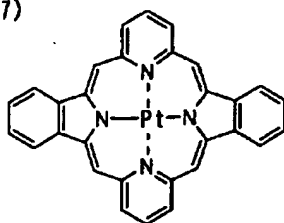
20

30

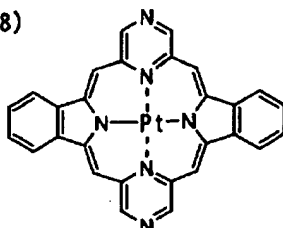
40

【化 60】

化合物(27)

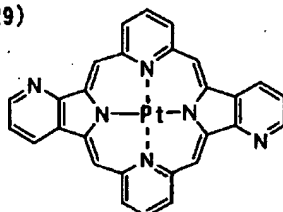


化合物(28)



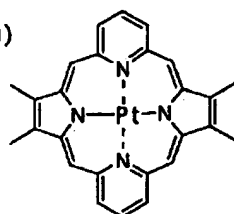
10

化合物(29)

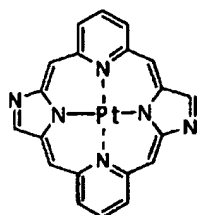


20

化合物(30)

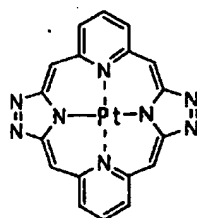


化合物(31)



30

化合物(32)

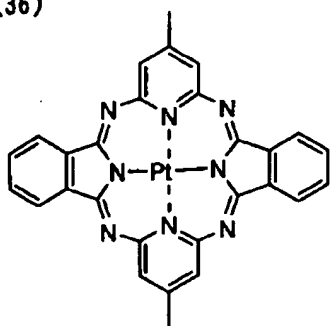


40

【 0 2 8 6 】

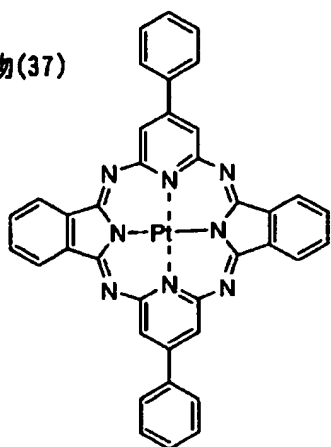
【化 6 1】

化合物(36)



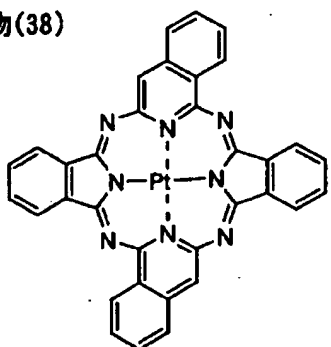
10

化合物(37)



20

化合物(38)

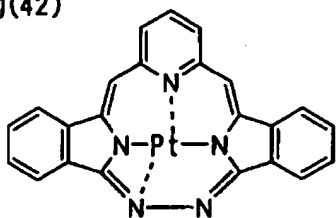


30

【 0 2 8 7 】

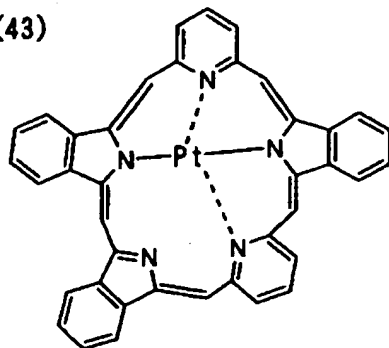
【化 6 2】

化合物(42)



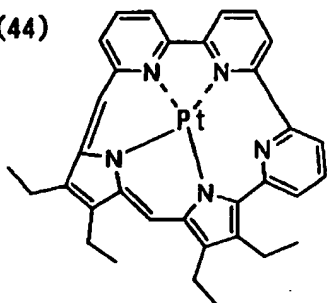
10

化合物(43)



20

化合物(44)

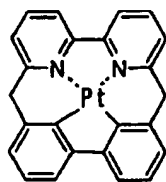


30

【 0 2 8 8 】

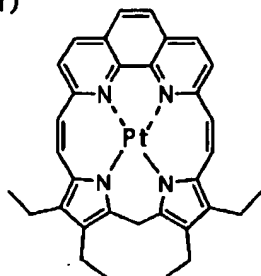
【化 6 3】

化合物(50)



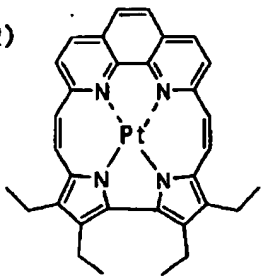
化合物(51)

10



化合物(52)

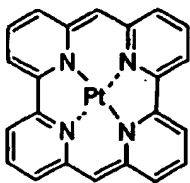
20



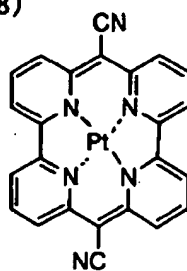
【 0 2 8 9 】

【化 6 4】

化合物(57)

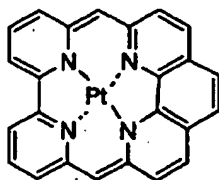


化合物(58)

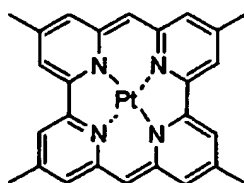


10

化合物(59)

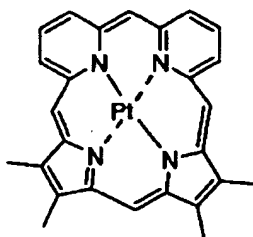


化合物(60)



20

化合物(61)

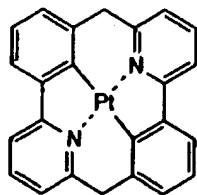


30

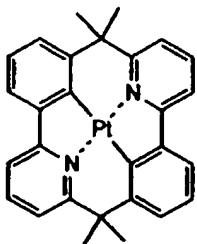
【 0 2 9 0 】

【化 6 5】

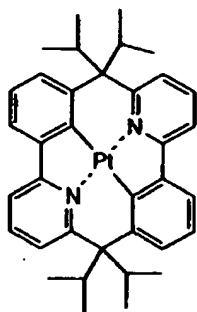
化合物(62)



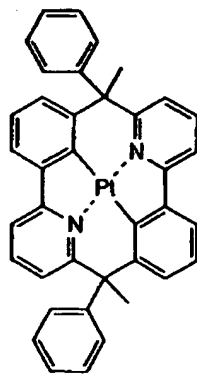
化合物(64)



化合物(66)

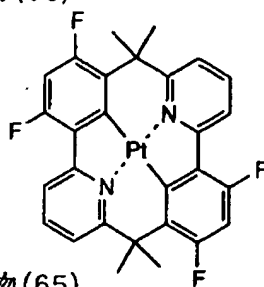


化合物(68)

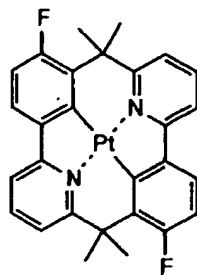


【 0 2 9 1】

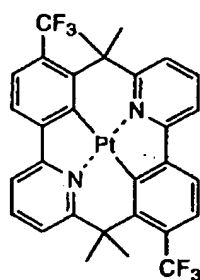
化合物(63)



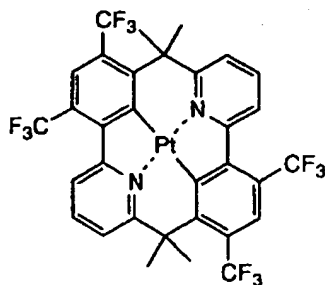
化合物(65)



化合物(67)



化合物(69)



10

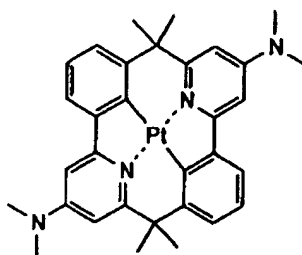
20

30

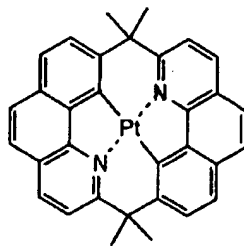
40

【化 6 6】

化合物(70)

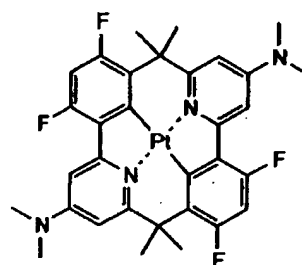


化合物(71)

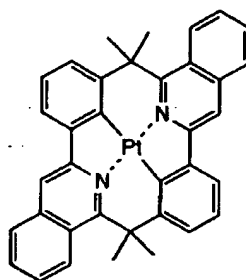


10

化合物(72)

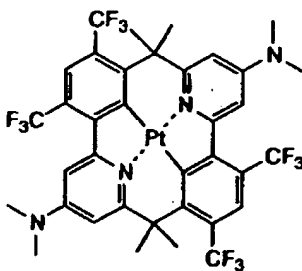


化合物(73)

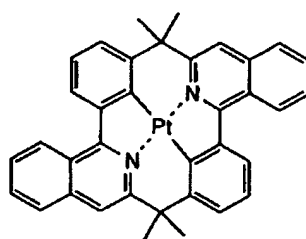


20

化合物(74)

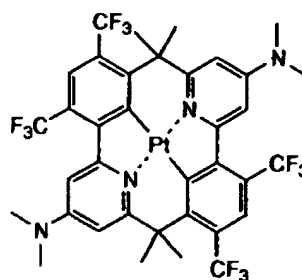


化合物(75)

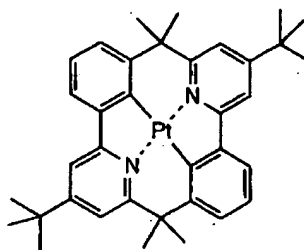


30

化合物(76)



化合物(77)

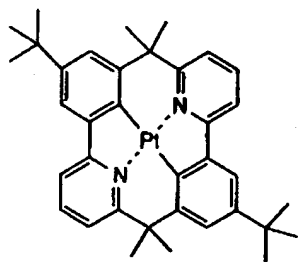


40

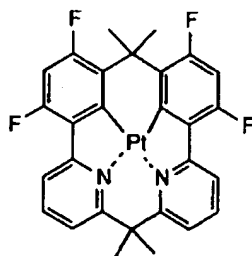
【 0 2 9 2 】

【化 6 7】

化合物(78)

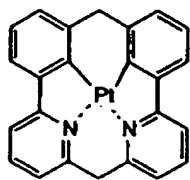


化合物(79)

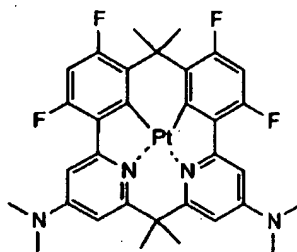


10

化合物(80)

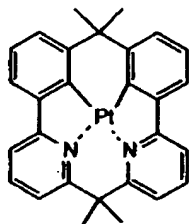


化合物(81)

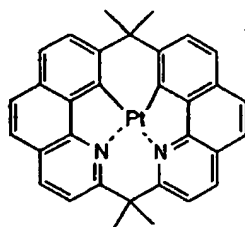


20

化合物(82)

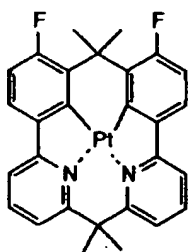


化合物(83)

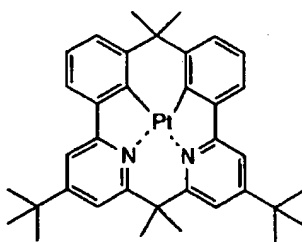


30

化合物(84)



化合物(85)

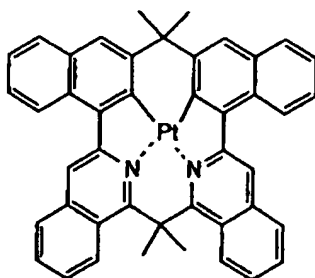


40

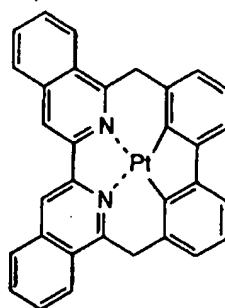
【 0 2 9 3 】

【化 6 8】

化合物(86)

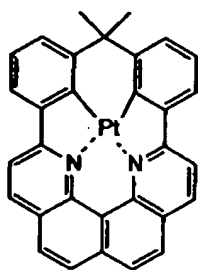


化合物(87)

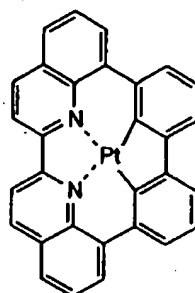


10

化合物(88)

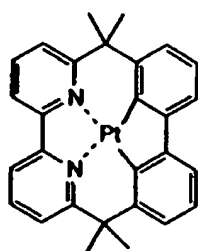


化合物(89)

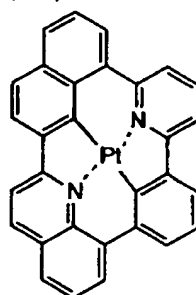


20

化合物(90)

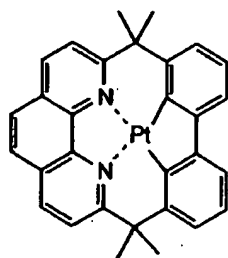


化合物(91)

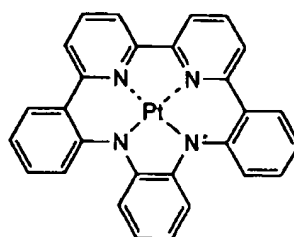


30

化合物(92)



化合物(93)

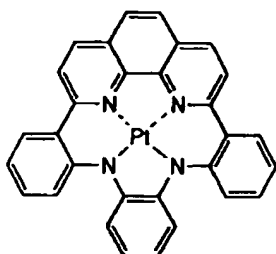


40

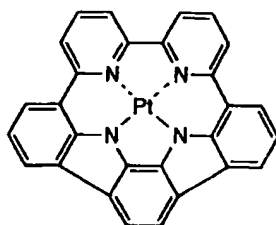
【 0 2 9 4 】

【化 6 9】

化合物(94)

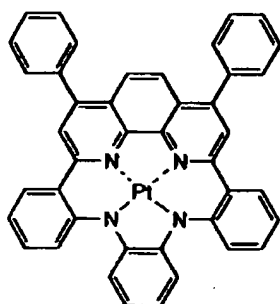


化合物(95)

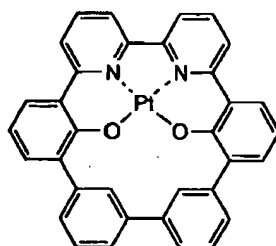


10

化合物(96)

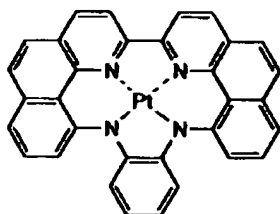


化合物(97)

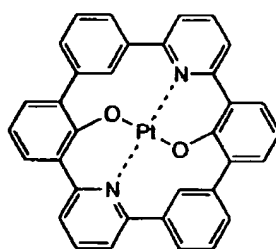


20

化合物(98)

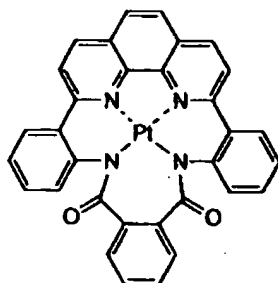


化合物(99)

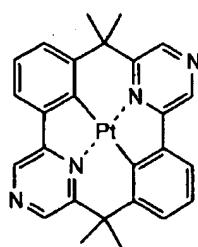


30

化合物(100)



化合物(101)

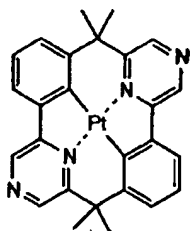


40

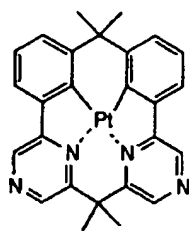
【 0 2 9 5 】

【化 7 0】

化合物(102)

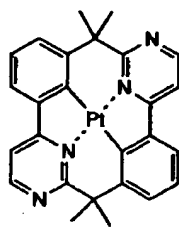


化合物(103)

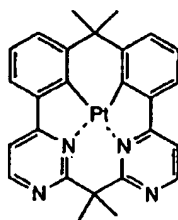


10

化合物(104)

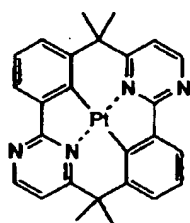


化合物(105)

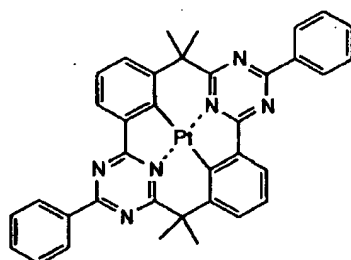


20

化合物(106)

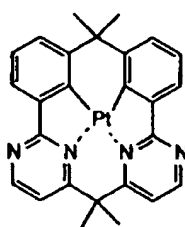


化合物(107)

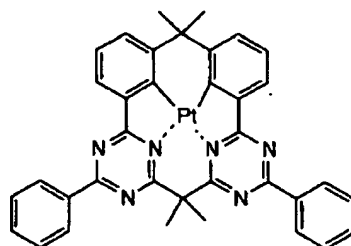


30

化合物(108)



化合物(109)

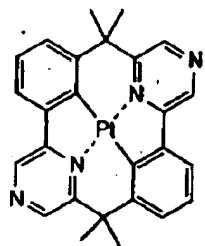


40

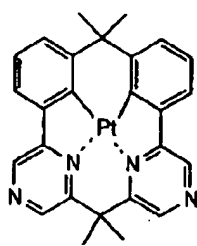
【 0 2 9 6 】

【化 7 1】

化合物(110)

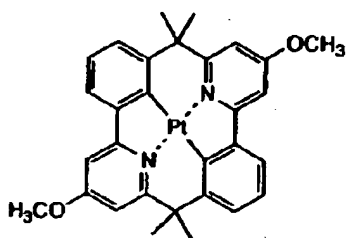


化合物(111)

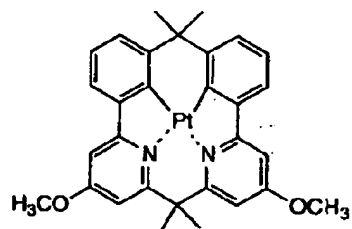


10

化合物(112)

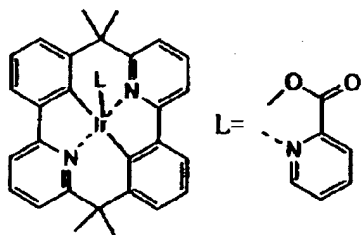


化合物(113)

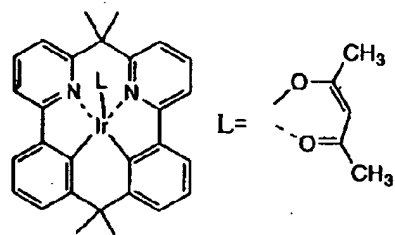


20

化合物(114)

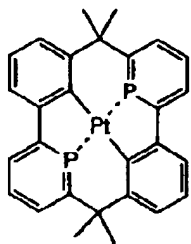


化合物(115)

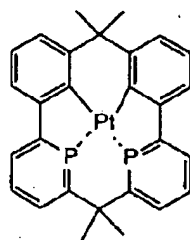


30

化合物(116)



化合物(117)

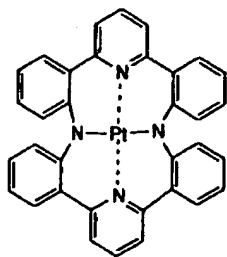


40

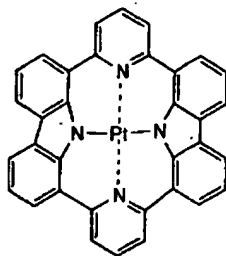
【 0 2 9 7】

【化 7 2】

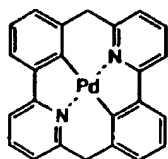
化合物(118)



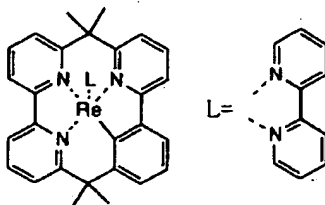
化合物(119)



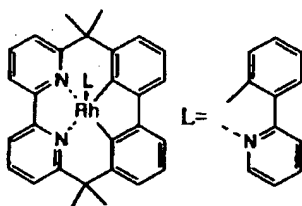
化合物(120)



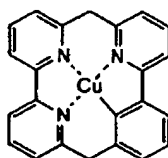
化合物(121)



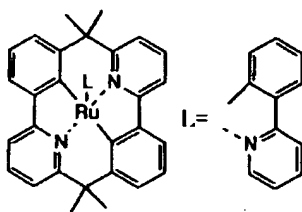
化合物(122)



化合物(123)



化合物(124)



【 0 2 9 8 】

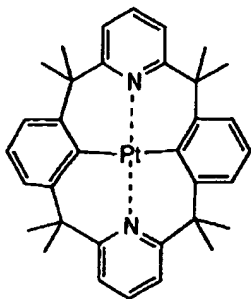
10

20

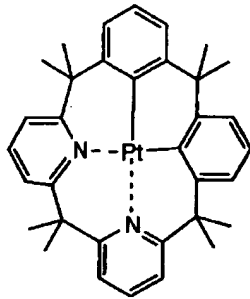
30

【化 7 3】

化合物(125)

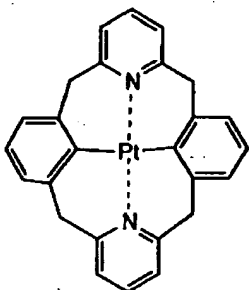


化合物(126)

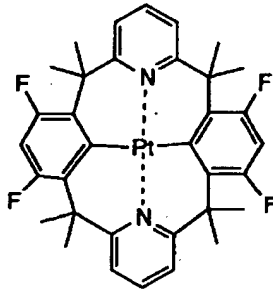


10

化合物(127)

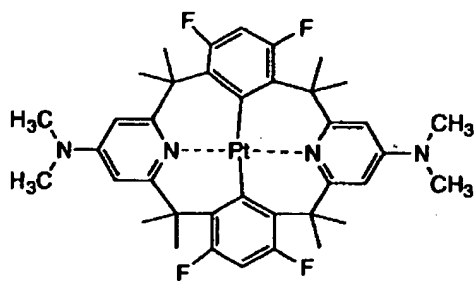


化合物(128)

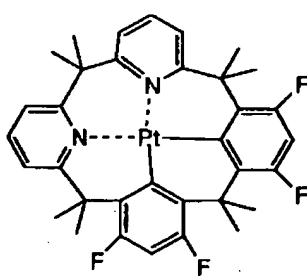


20

化合物(129)

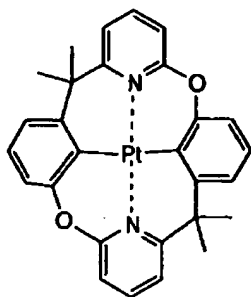


化合物(130)

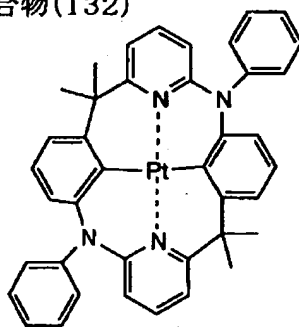


30

化合物(131)



化合物(132)

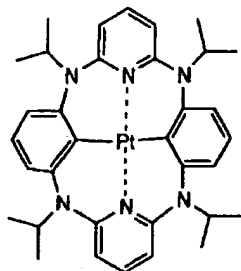


40

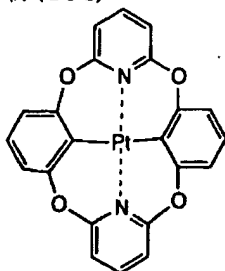
【0 2 9 9】

【化 7 4】

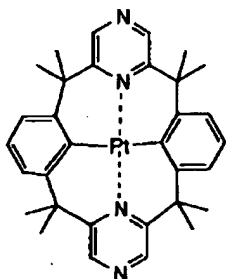
化合物(133)



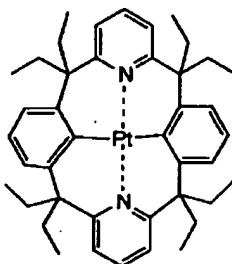
化合物(134)



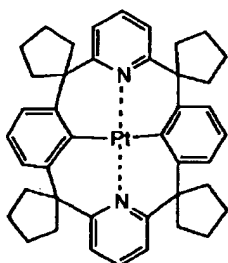
化合物(135)



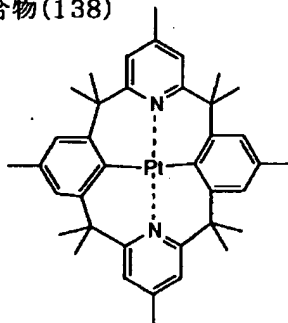
化合物(136)



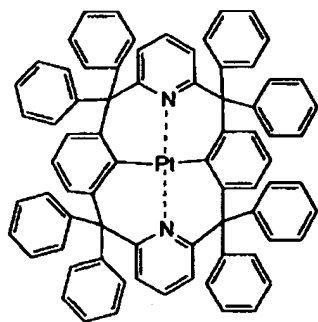
化合物(137)



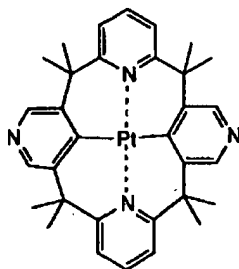
化合物(138)



化合物(139)



化合物(140)



【0300】

10

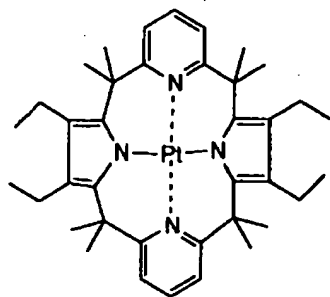
20

30

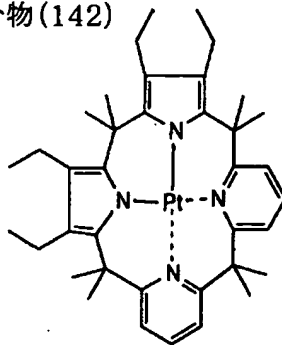
40

【化 7 5】

化合物(141)

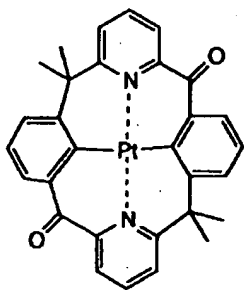


化合物(142)

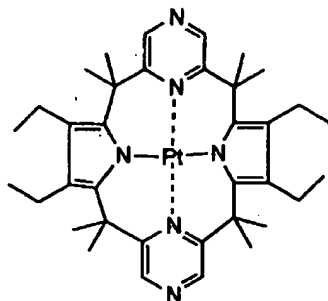


10

化合物(143)

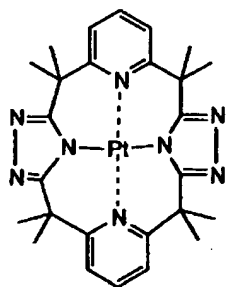


化合物(144)

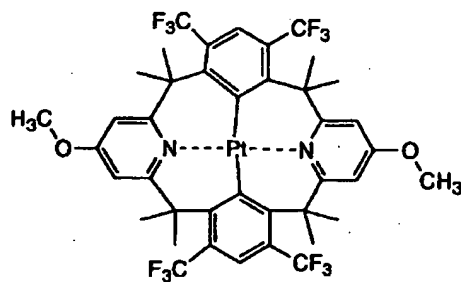


20

化合物(145)

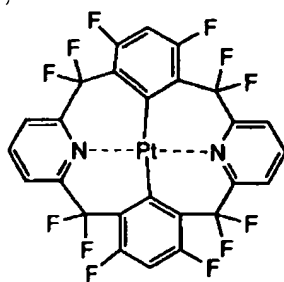


化合物(146)

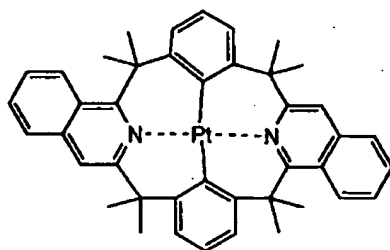


30

化合物(147)



化合物(148)

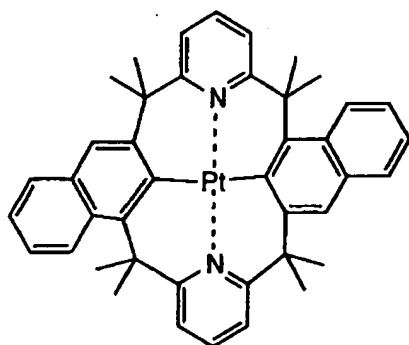


40

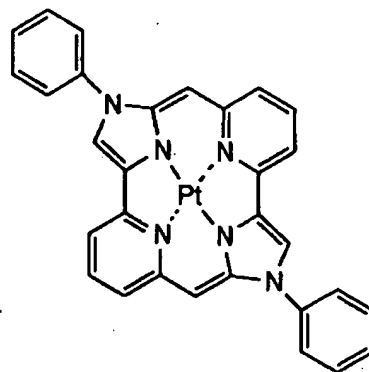
【0 3 0 1】

【化 7 6】

化合物(149)

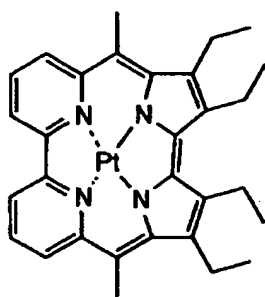


化合物(150)

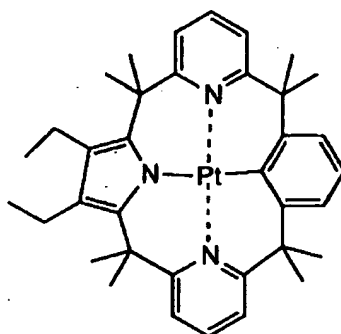


10

化合物(151)

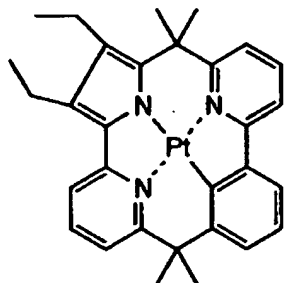


化合物(152)

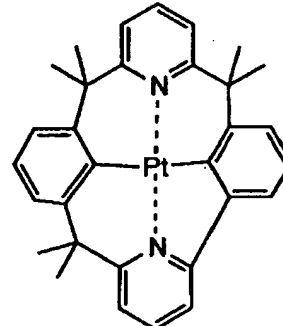


20

化合物(153)



化合物(154)



30

【0302】

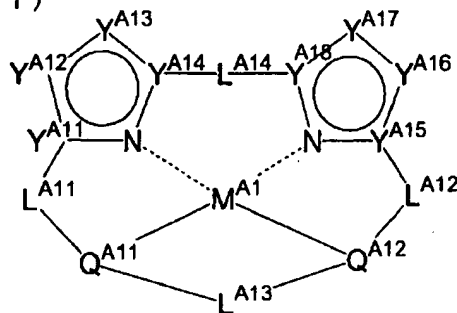
さらに、本発明における金属錯体の好ましい例としては、下記一般式(A-1)、下記一般式(B-1)、下記一般式(C-1)、下記一般式(D-1)、下記一般式(E-1) 40
)、及び下記一般式(F-1)で表される各化合物が挙げられる。

一般式(A-1)について説明する。

【0303】

【化 7 7】

一般式(A-1)



10

【0304】

一般式(A-1)中、 M^{A1} は金属イオンを表す。 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} および Y^{A18} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} および Y^{A17} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} は連結基を表し、これらの連結基は、同一構造であっても異なる構造であっても良い。 Q^{A11} 、 Q^{A12} は M^{A1} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

20

【0305】

一般式(A-1)で表される化合物について、詳細に説明する。

M^{A1} は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されることはないが、2価の金属イオンが好ましく、 Pt^{2+} 、 Pd^{2+} 、 Cu^{2+} 、 Ni^{2+} 、 Co^{2+} 、 Zn^{2+} 、 Mg^{2+} 、 Pb^{2+} が好ましく、 Pt^{2+} 、 Cu^{2+} がより好ましく、 Pt^{2+} が特に好ましい。

Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} および Y^{A18} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} および Y^{A18} として好ましくは、炭素原子である。

Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} および Y^{A17} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} および Y^{A17} として好ましくは、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子である。

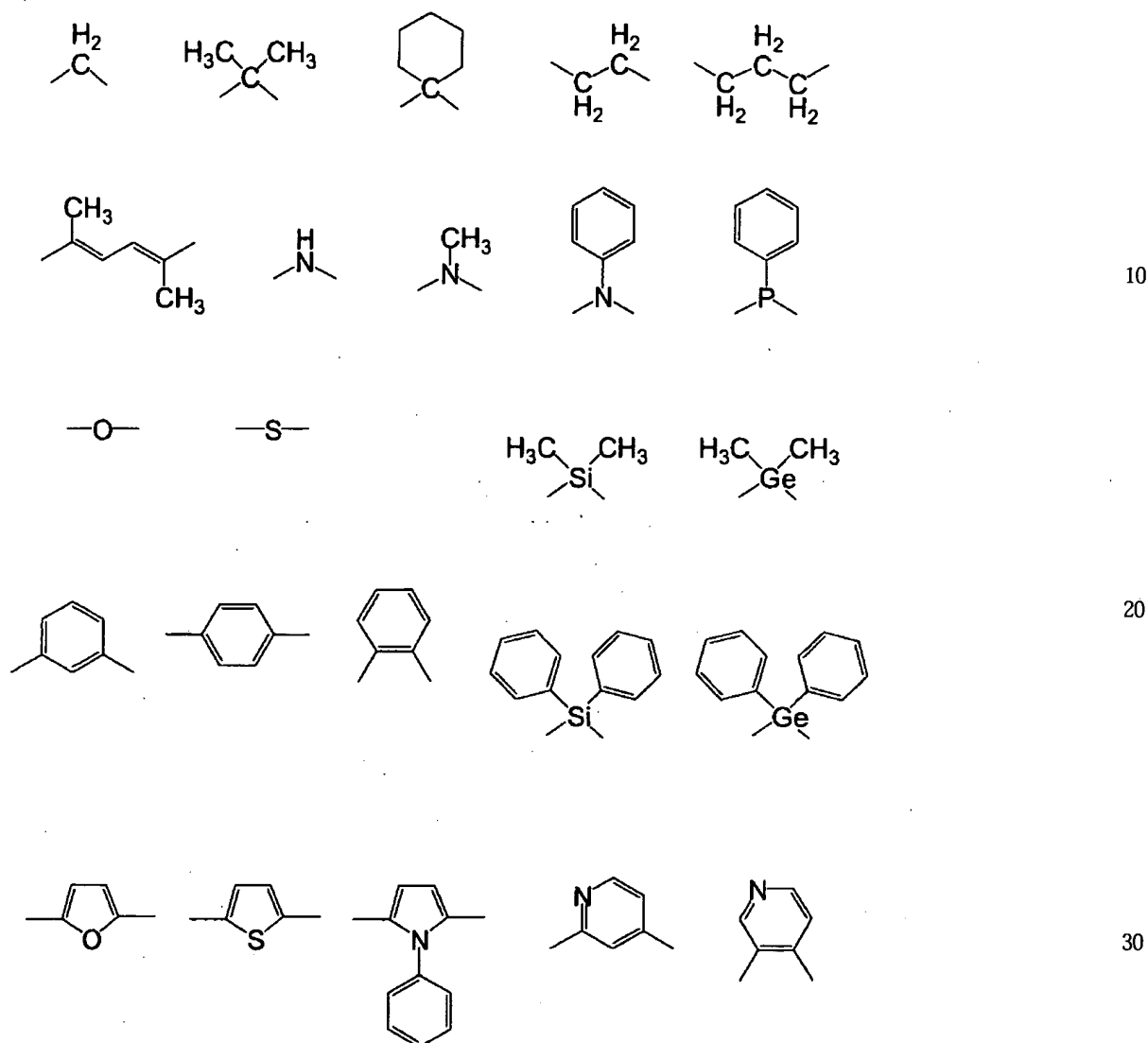
30

L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} は二価の連結基を表す。 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基としては、それぞれ独立に単結合のほか、炭素、窒素、珪素、硫黄、酸素、ゲルマニウム、リン等で構成される連結基であり、より好ましくは、単結合、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、置換珪素原子、酸素原子、硫黄原子、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族ヘテロ環基であり、さらに好ましくは単結合、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、置換珪素原子、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族ヘテロ環基であり、特に好ましくは、単結合、置換または無置換のメチレン基である。 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基としては、例えば以下のものが挙げられる。

【0306】

40

【化 7 8】



【0307】

L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基は、さらに置換基を有していてもよい。導入可能な置換基としては、アルキル基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメチル、エチル、*i*so-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、

【0308】

アリール基（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニル、*p*-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数0～30、より好ましくは炭素数0～20、特に好ましくは炭素数0～10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチ

ルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメトキシ、エトキシ、プロトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリーロキシ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニロキシ、1-ナフチロキシ、2-ナフチロキシなどが挙げられる。)、

【0309】

ヘテロ環オキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニル基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニロキシカルボニルなどが挙げられる。)、

【0310】

アシルオキシ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニロキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、

【0311】

スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数0~30、より好ましくは炭素数0~20、特に好ましくは炭素数0~12であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、

【0312】

アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、

【0313】

ウレイド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましく

10

20

30

40

50

は炭素数 1 ～ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基 (好ましくは炭素数 1 ～ 30、より好ましくは炭素数 1 ～ 20、特に好ましくは炭素数 1 ～ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子 (例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、

【0314】

ヘテロ環基 (好ましくは炭素数 1 ～ 30、より好ましくは炭素数 1 ～ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子であり、具体的にはイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基 (好ましくは炭素数 3 ～ 40、より好ましくは炭素数 3 ～ 30、特に好ましくは炭素数 3 ～ 24 であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基 (好ましくは炭素数 3 ～ 40、より好ましくは炭素数 3 ～ 30、特に好ましくは炭素数 3 ～ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。) などが挙げられる。

【0315】

これらの置換基は更に置換されてもよい。置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ハロゲン原子、シリル基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ハロゲン原子であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、フッ素原子である。

【0316】

Q^{A11} 、 Q^{A12} は M^{A1} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。 Q^{A11} 、 Q^{A12} はそれぞれ独立に M^{A1} に炭素原子で結合する基、窒素原子で結合する基、珪素原子で結合する基、リン原子で結合する基、酸素原子で結合する基、硫黄原子で結合する基が好ましく、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子で結合する基がより好ましく、炭素原子、窒素原子で結合する基がさらに好ましく、炭素原子で結合する基が特に好ましい。

【0317】

炭素原子で結合する基としては、炭素原子で結合するアリール基、炭素原子で結合する五員環ヘテロアリール基、炭素原子で結合する六員環ヘテロアリール基が好ましく、炭素原子で結合するアリール基、炭素原子で結合する含窒素五員環ヘテロアリール基、炭素原子で結合する含窒素六員環ヘテロアリール基がより好ましく、炭素原子で結合するアリール基が特に好ましい。

【0318】

窒素原子で結合する基としては、置換アミノ基、窒素原子で結合する含窒素ヘテロ五員環ヘテロアリール基が好ましく、窒素原子で結合する含窒素ヘテロ五員環ヘテロアリール基が特に好ましい。

【0319】

リン原子で結合する基としては、置換ホスフィノ基が好ましい。珪素原子で結合する基としては、置換シリル基が好ましい。酸素原子で結合する基としてはオキシ基、硫黄原子で結合する基としてはスルフィド基が好ましい。

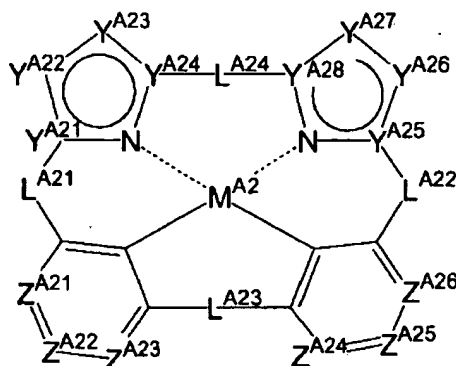
【0320】

前記一般式 (A-1) で表される化合物は、より好ましくは一般式 (A-2)、一般式 (A-3)、又は一般式 (A-4) で表される化合物である。

【0321】

【化 7 9】

一般式 (A-2)



10

【0322】

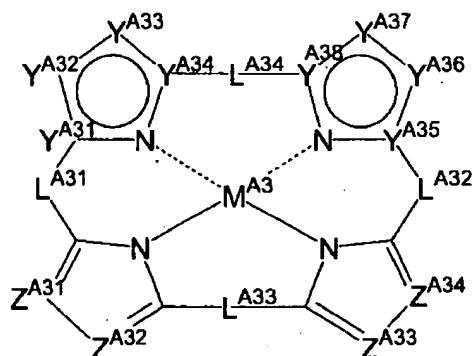
一般式 (A-2) 中、 M^{A2} は金属イオンを表す。 Y^{A21} 、 Y^{A24} 、 Y^{A25} および Y^{A28} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{A22} 、 Y^{A23} 、 Y^{A26} および Y^{A27} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{A21} 、 L^{A22} 、 L^{A23} 、 L^{A24} は連結基を表す。 Z^{A21} 、 Z^{A22} 、 Z^{A23} 、 Z^{A24} 、 Z^{A25} および Z^{A26} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

20

【0323】

【化 8 0】

一般式 (A-3)



30

【0324】

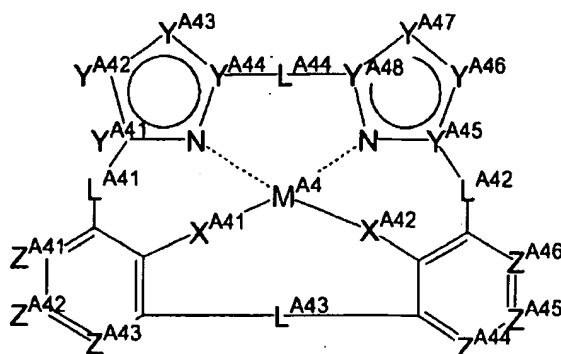
一般式 (A-3) 中、 M^{A3} は金属イオンを表す。 Y^{A31} 、 Y^{A34} 、 Y^{A35} および Y^{A38} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{A32} 、 Y^{A33} 、 Y^{A36} および Y^{A37} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{A31} 、 L^{A32} 、 L^{A33} 、 L^{A34} は連結基を表す。 Z^{A31} 、 Z^{A32} 、 Z^{A33} および Z^{A34} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

40

【0325】

【化 8 1】

一般式 (A-4)



10

【0326】

一般式 (A-4) 中、 M^{A4} は金属イオンを表す。 Y^{A41} 、 Y^{A44} 、 Y^{A45} および Y^{A48} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{A42} 、 Y^{A43} 、 Y^{A46} および Y^{A47} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{A41} 、 L^{A42} 、 L^{A43} 、 L^{A44} は連結基を表す。 Z^{A41} 、 Z^{A42} 、 Z^{A43} 、 Z^{A44} 、 Z^{A45} および Z^{A46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 X^{A41} 、 X^{A42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

20

【0327】

一般式 (A-2) で表される化合物について詳細に説明する。

M^{A2} 、 Y^{A21} 、 Y^{A24} 、 Y^{A25} 、 Y^{A28} 、 Y^{A22} 、 Y^{A23} 、 Y^{A26} 、 Y^{A27} 、 L^{A21} 、 L^{A22} 、 L^{A23} 、 L^{A24} はそれぞれ対応する、一般式 (A-1) 中の M^{A1} 、 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} 、 Y^{A18} 、 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} 、 Y^{A17} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{A21} 、 Z^{A22} 、 Z^{A23} 、 Z^{A24} 、 Z^{A25} および Z^{A26} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{A21} 、 Z^{A22} 、 Z^{A23} 、 Z^{A24} 、 Z^{A25} および Z^{A26} として好ましくはそれぞれ独立に置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

30

【0328】

一般式 (A-3) で表される化合物について詳細に説明する。

M^{A3} 、 Y^{A31} 、 Y^{A34} 、 Y^{A35} 、 Y^{A38} 、 Y^{A32} 、 Y^{A33} 、 Y^{A36} 、 Y^{A37} 、 L^{A31} 、 L^{A32} 、 L^{A33} 、 L^{A34} はそれぞれ対応する、一般式 (A-1) 中の M^{A1} 、 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} 、 Y^{A18} 、 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} 、 Y^{A17} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{A31} 、 Z^{A32} 、 Z^{A33} 、および Z^{A34} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{A31} 、 Z^{A32} 、 Z^{A33} 、および Z^{A34} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

40

【0329】

一般式 (A-4) で表される化合物について詳細に説明する。

M^{A4} 、 Y^{A41} 、 Y^{A44} 、 Y^{A45} 、 Y^{A48} 、 Y^{A42} 、 Y^{A43} 、 Y^{A46} 、 Y^{A47} 、 L^{A41} 、 L^{A42} 、 L^{A43} 、 L^{A44} はそれぞれ対応する、一般式 (A-1) 中の M^{A1} 、 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} 、 Y^{A18} 、 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} 、 Y^{A17} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

50

Z^{A41} 、 Z^{A42} 、 Z^{A43} 、 Z^{A44} 、 Z^{A45} および Z^{A46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{A41} 、 Z^{A42} 、 Z^{A43} 、 Z^{A44} 、 Z^{A45} および Z^{A46} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

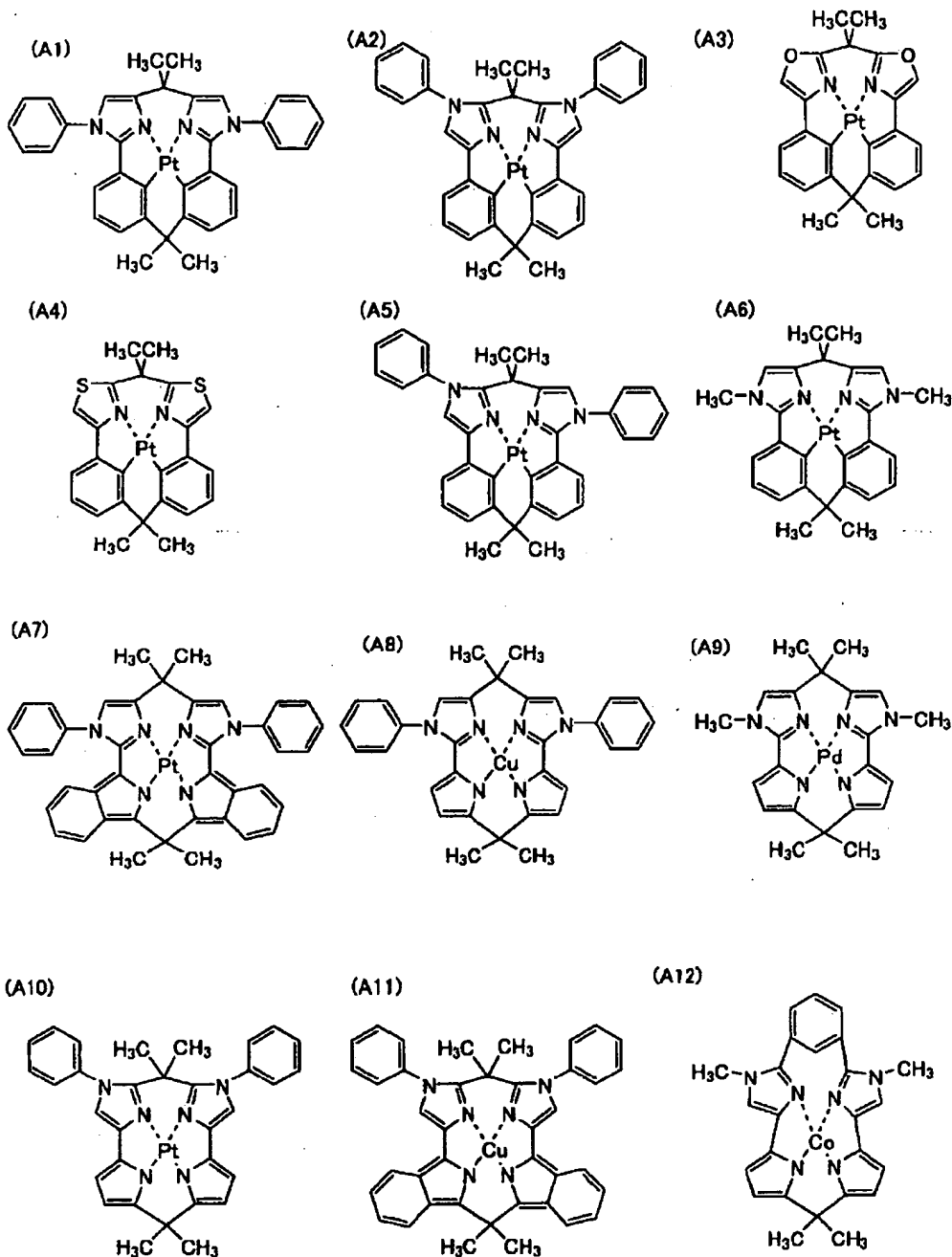
X^{A41} 、 X^{A42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 X^{A41} 、 X^{A42} として好ましくはそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

【0330】

一般式 (A-1) で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。 10

【0331】

【化 8 2】



10

20

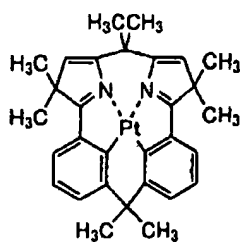
30

40

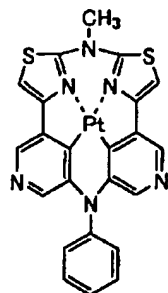
【 0 3 3 2】

【化 8 3】

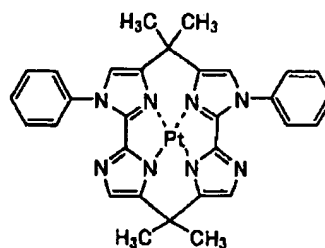
(A13)



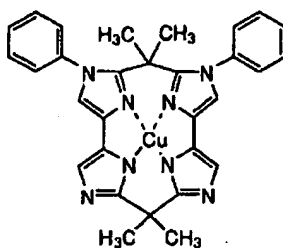
(A14)



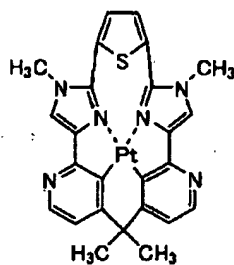
(A15)



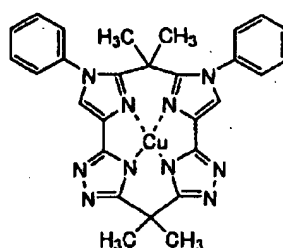
(A16)



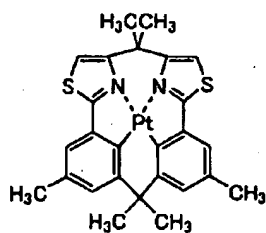
(A17)



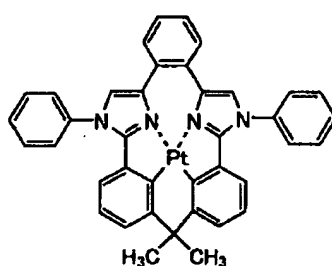
(A18)



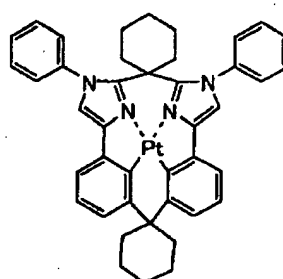
(A19)



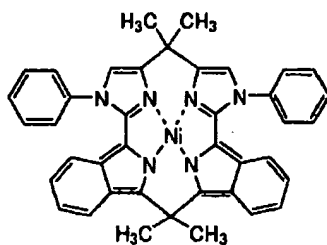
(A20)



(A21)



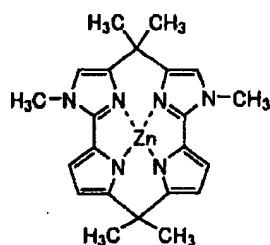
(A22)



(A23)



(A24)



【 0 3 3 3】

10

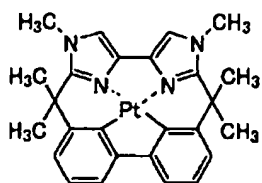
20

30

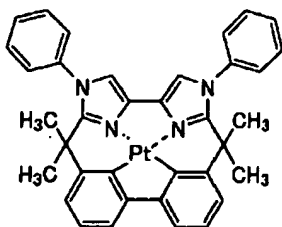
40

【化 8 4】

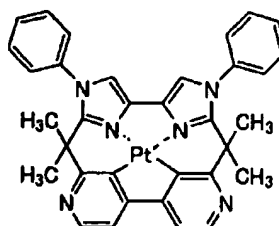
(A25)



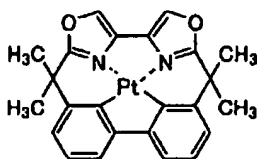
(A26)



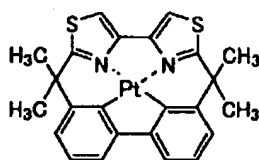
(A27)



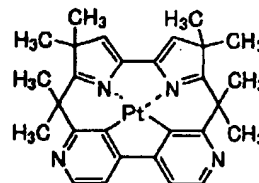
(A28)



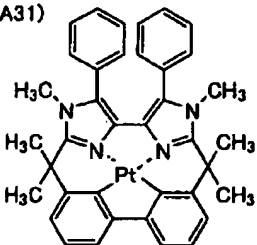
(A29)



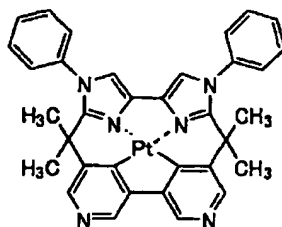
(A30)



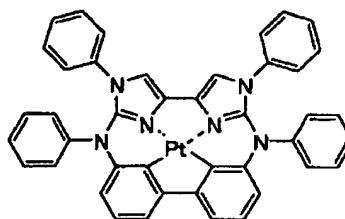
(A31)



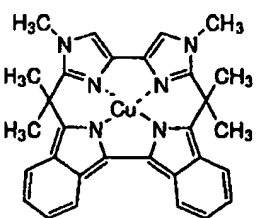
(A32)



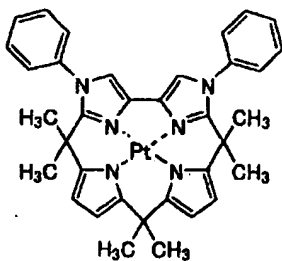
(A33)



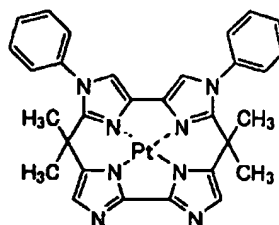
(A34)



(A35)



(A36)



【 0 3 3 4】

10

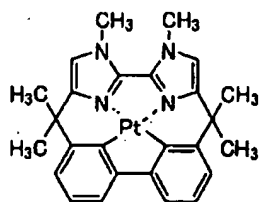
20

30

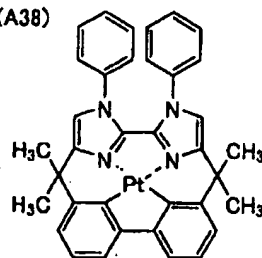
40

【化 8 5】

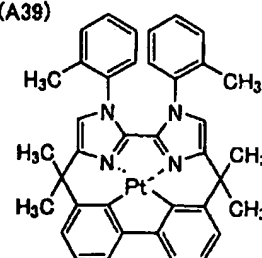
(A37)



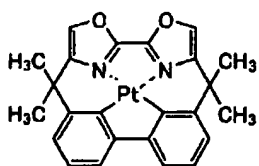
(A38)



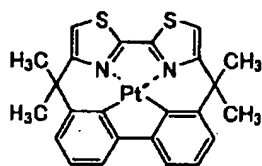
(A39)



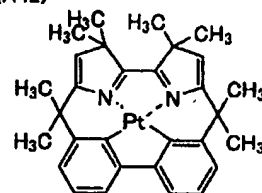
(A40)



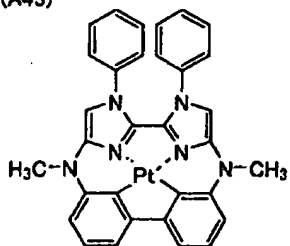
(A41)



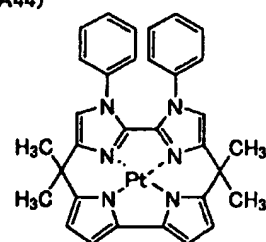
(A42)



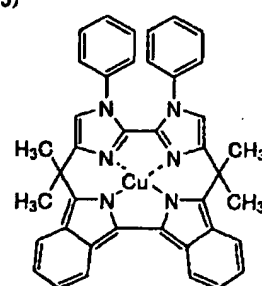
(A43)



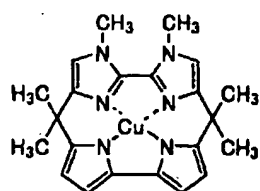
(A44)



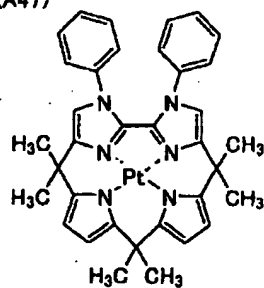
(A45)



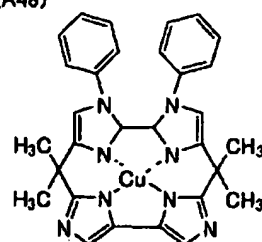
(A46)



(A47)



(A48)



【 0 3 3 5 】

10

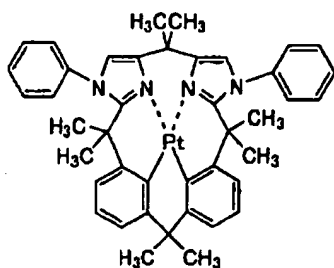
20

30

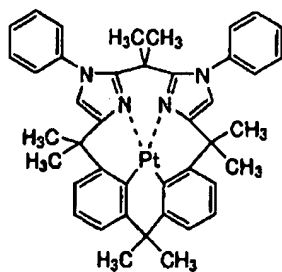
40

【化 8 6】

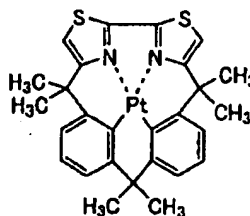
(A49)



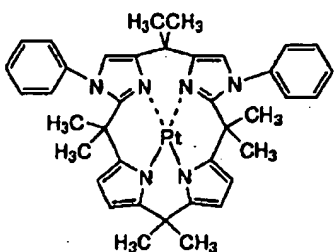
(A50)



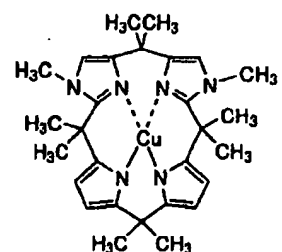
(A51)



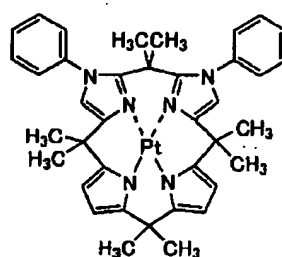
(A52)



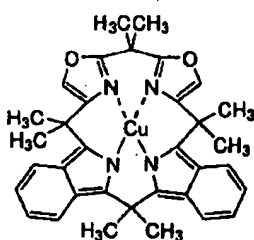
(A53)



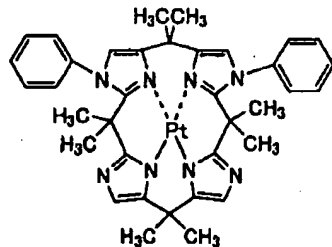
(A54)



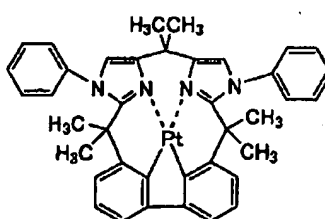
(A55)



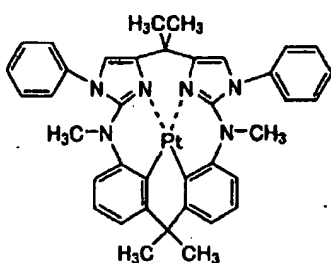
(A56)



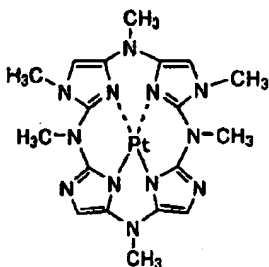
(A57)



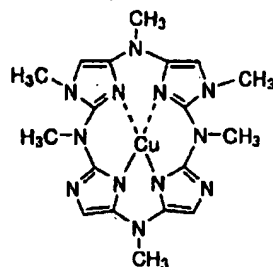
(A58)



(A59)



(A60)



【 0 3 3 6 】

10

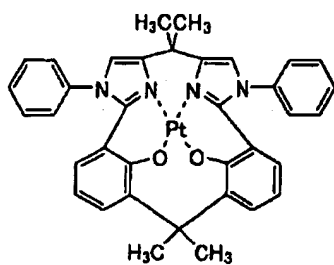
20

30

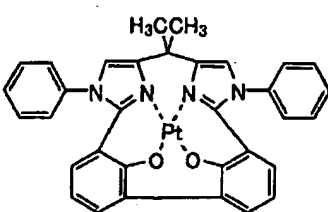
40

【化 8 7】

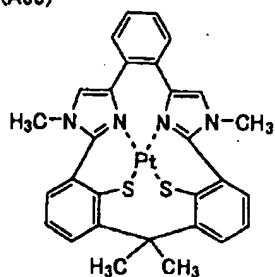
(A61)



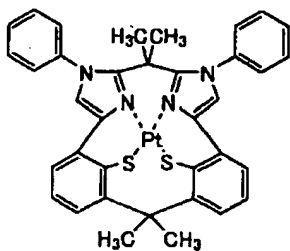
(A62)



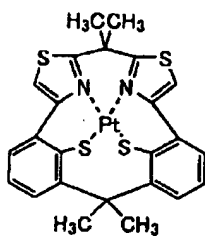
(A63)



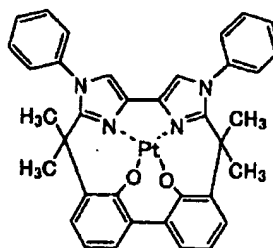
(A64)



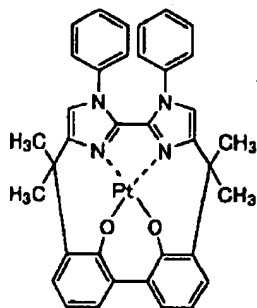
(A65)



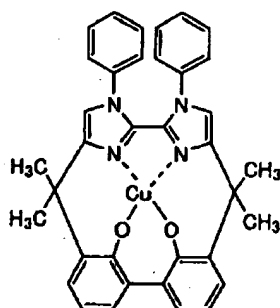
(A66)



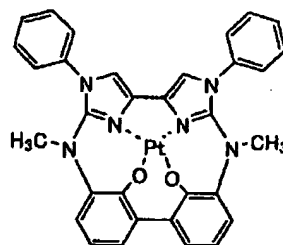
(A67)



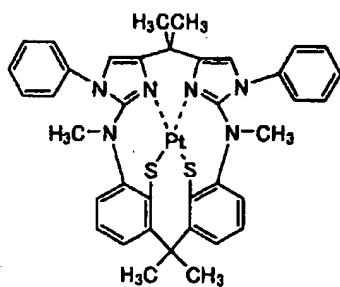
(A68)



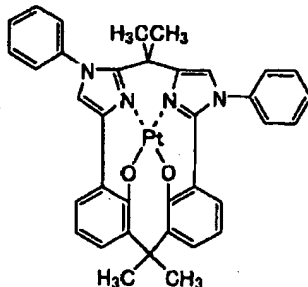
(A69)



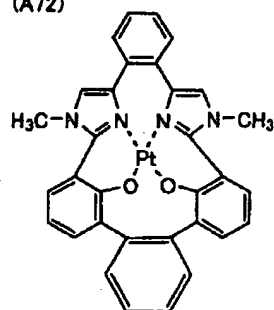
(A70)



(A71)



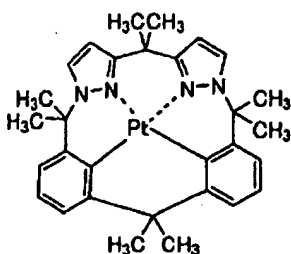
(A72)



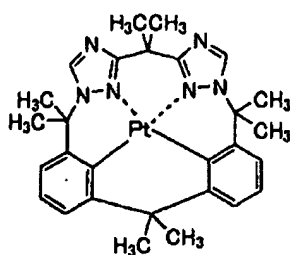
【 0 3 3 7 】

【化 8 8】

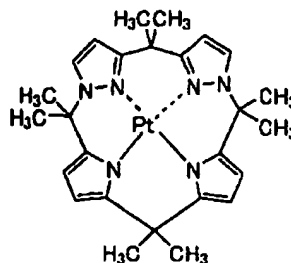
(A73)



(A74)

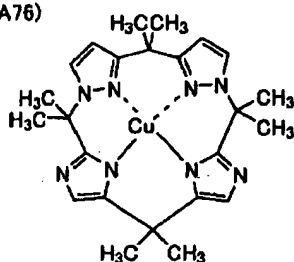


(A75)

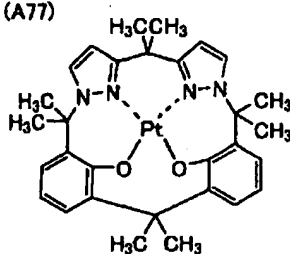


10

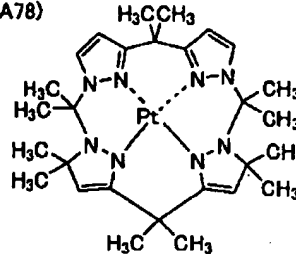
(A76)



(A77)

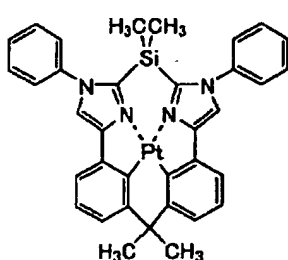


(A78)

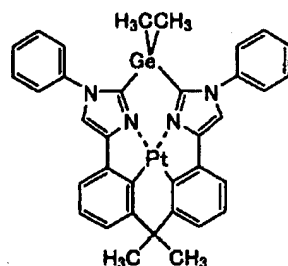


20

(A79)



(A80)



30

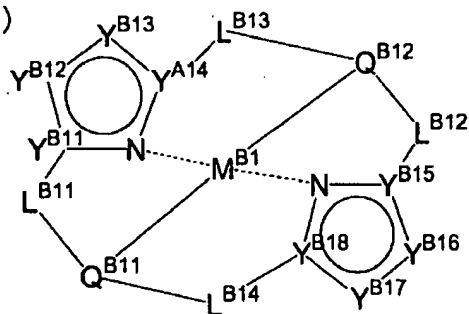
【 0 3 3 8】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式 (B-1) で表される化合物である。

【 0 3 3 9】

【化 8 9】

一般式 (B-1)



40

【 0 3 4 0】

一般式 (B-1) 中、 M^{B1} は金属イオンを表す。 Y^{B11} 、 Y^{B14} 、 Y^{B15} および Y^{B18} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{B12} 、 Y^{B13} 、 Y^{B16} および Y^{B17} はそれ

50

それぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{B11} 、 L^{B12} 、 L^{B13} 、 L^{B14} は連結基を表す。 Q^{B11} 、 Q^{B12} は M^{B1} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

【0341】

一般式 (B-1) について詳細に説明する。

一般式 (B-1) 中、 M^{B1} 、 Y^{B11} 、 Y^{B14} 、 Y^{B15} 、 Y^{B18} 、 Y^{B12} 、 Y^{B13} 、 Y^{B16} 、 Y^{B17} 、 L^{B11} 、 L^{B12} 、 L^{B13} 、 L^{B14} 、 Q^{B11} 、 Q^{B12} は、それぞれ対応する、一般式 (A-1) 中における、 M^{A1} 、 Y^{A11} 、 Y^{A14} 、 Y^{A15} 、 Y^{A18} 、 Y^{A12} 、 Y^{A13} 、 Y^{A16} 、 Y^{A17} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} 、 Q^{A11} 、 Q^{A12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

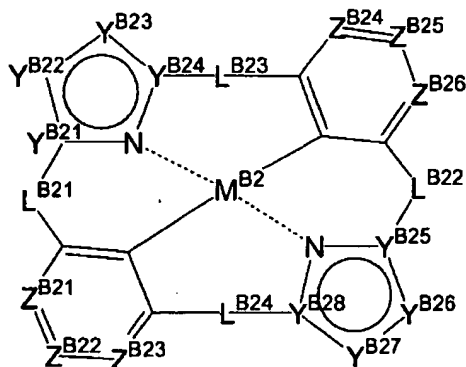
【0342】

一般式 (B-1) で表される化合物は、より好ましくは、下記一般式 (B-2)、一般式 (B-3)、又は一般式 (B-4) で表される化合物である。

【0343】

【化90】

一般式 (B-2)



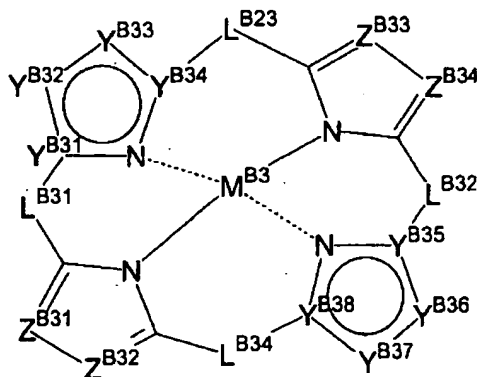
【0344】

一般式 (B-2) 中、 M^{B2} は金属イオンを表す。 Y^{B21} 、 Y^{B24} 、 Y^{B25} および Y^{B28} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{B22} 、 Y^{B23} 、 Y^{B26} および Y^{B27} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{B21} 、 L^{B22} 、 L^{B23} 、 L^{B24} は連結基を表す。 Z^{B21} 、 Z^{B22} 、 Z^{B23} 、 Z^{B24} 、 Z^{B25} および Z^{B26} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0345】

【化91】

一般式 (B-3)



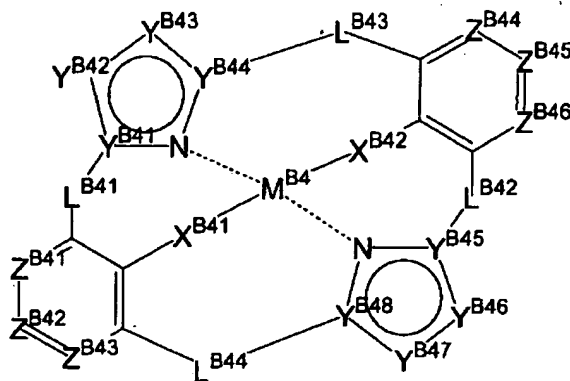
【0346】

一般式 (B-3) 中、 M^{B3} は金属イオンを表す。 Y^{B31} 、 Y^{B34} 、 Y^{B35} および Y^{B38} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{B32} 、 Y^{B33} 、 Y^{B36} および Y^{B37} は、それぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{B31} 、 L^{B32} 、 L^{B33} 、 L^{B34} は連結基を表す。 Z^{B31} 、 Z^{B32} 、 Z^{B33} および Z^{B34} は、それぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0347】

【化92】

一般式 (B-4)



【0348】

一般式 (B-4) 中、 M^{B4} は金属イオンを表す。 Y^{B41} 、 Y^{B44} 、 Y^{B45} および Y^{B48} は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 Y^{B42} 、 Y^{B43} 、 Y^{B46} および Y^{B47} はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 L^{B41} 、 L^{B42} 、 L^{B43} 、 L^{B44} は連結基を表す。 Z^{B41} 、 Z^{B42} 、 Z^{B43} 、 Z^{B44} 、 Z^{B45} および Z^{B46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 X^{B41} 、 X^{B42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【0349】

一般式 (B-2) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (B-2) 中、 M^{B2} 、 Y^{B21} 、 Y^{B24} 、 Y^{B25} 、 Y^{B28} 、 Y^{B22} 、 Y^{B23} 、 Y^{B26} 、 Y^{B27} 、 L^{B21} 、 L^{B22} 、 L^{B23} 、 L^{B24} はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の M^{B1} 、 Y^{B11} 、 Y^{B14} 、 Y^{B15} 、 Y^{B18} 、 Y^{B12} 、 Y^{B13} 、 Y^{B16} 、 Y^{B17} 、 L^{B11} 、 L^{B12} 、 L^{B13} 、 L^{B14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{B21} 、 Z^{B22} 、 Z^{B23} 、 Z^{B24} 、 Z^{B25} および Z^{B26} は、それぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{B21} 、 Z^{B22} 、 Z^{B23} 、 Z^{B24} 、 Z^{B25} および Z^{B26} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0350】

一般式 (B-3) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (B-3) 中、 M^{B3} 、 Y^{B31} 、 Y^{B34} 、 Y^{B35} 、 Y^{B38} 、 Y^{B32} 、 Y^{B33} 、 Y^{B36} 、 Y^{B37} 、 L^{B31} 、 L^{B32} 、 L^{B33} 、 L^{B34} はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の M^{B1} 、 Y^{B11} 、 Y^{B14} 、 Y^{B15} 、 Y^{B18} 、 Y^{B12} 、 Y^{B13} 、 Y^{B16} 、 Y^{B17} 、 L^{B11} 、 L^{B12} 、 L^{B13} 、 L^{B14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{B31} 、 Z^{B32} 、 Z^{B33} 、および Z^{B34} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{B31} 、 Z^{B32} 、 Z^{B33} 、および Z^{B34} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0351】

一般式 (B-4) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (B-4) 中、 M^{B4} 、 Y^{B41} 、 Y^{B44} 、 Y^{B45} 、 Y^{B48} 、 Y^{B42} 、 Y^{B43} 、 Y^{B46} 、 Y^{B47} 、 L^{B41} 、 L^{B42} 、 L^{B43} 、 L^{B44} はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の M^{B1} 、 Y^{B11} 、 Y^{B14} 、 Y^{B15} 、 Y^{B18} 、 Y^{B12} 、 Y^{B13} 、 Y^{B16} 、 Y^{B17} 、 L^{B11} 、 L^{B12} 、 L^{B13} 、 L^{B14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{B41} 、 Z^{B42} 、 Z^{B43} 、 Z^{B44} 、 Z^{B45} および Z^{B46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{B41} 、 Z^{B42} 、 Z^{B43} 、 Z^{B44} 、 Z^{B45} および Z^{B46} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

10

X^{B41} 、 X^{B42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 X^{B41} 、 X^{B42} として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

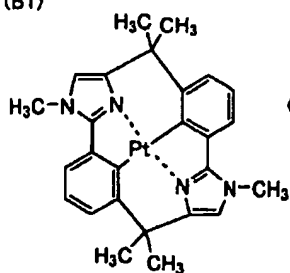
【0352】

一般式 (B-1) で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

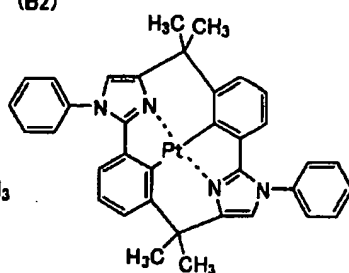
【0353】

【化 9 3】

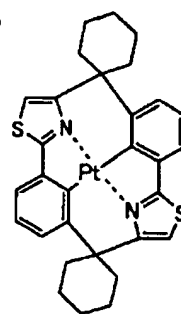
(B1)



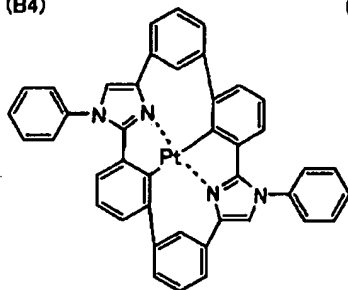
(B2)



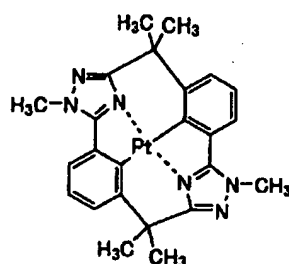
(B3)



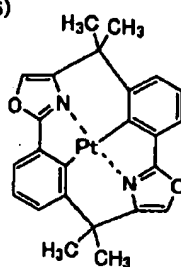
(B4)



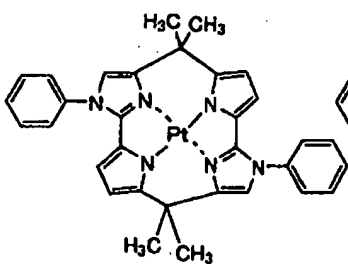
(B5)



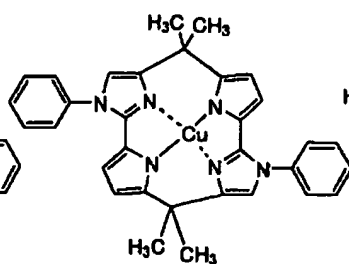
(B6)



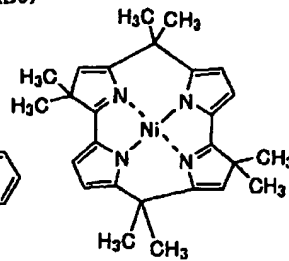
(B7)



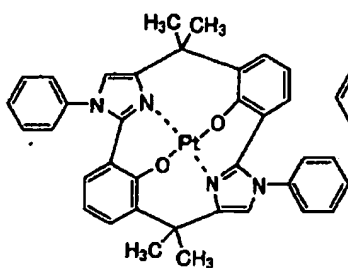
(B8)



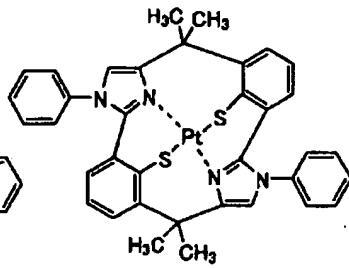
(B9)



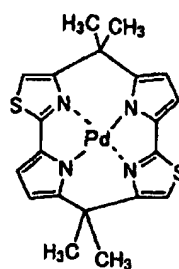
(B10)



(B11)



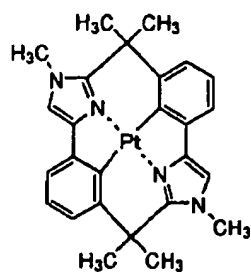
(B12)



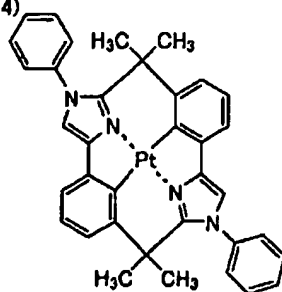
【 0 3 5 4】

【化 9 4】

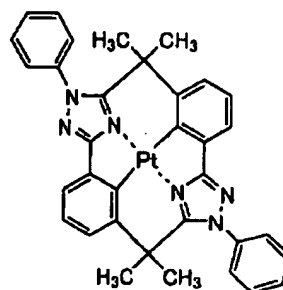
(B13)



(B14)

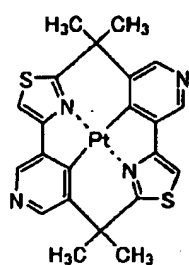


(B15)

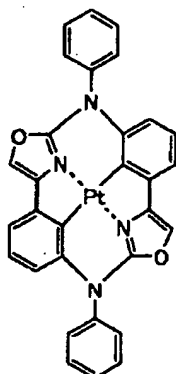


10

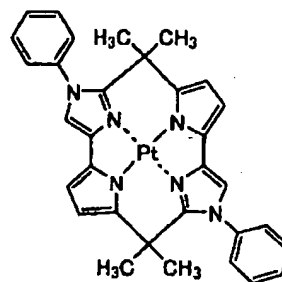
(B16)



(B17)

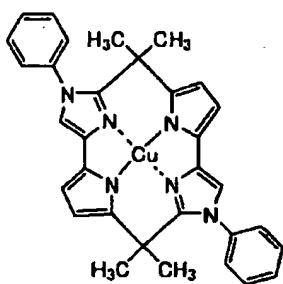


(B18)

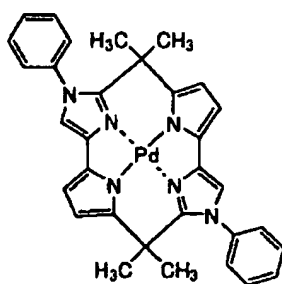


20

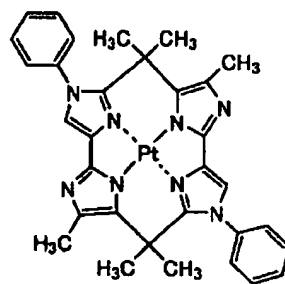
(B19)



(B20)

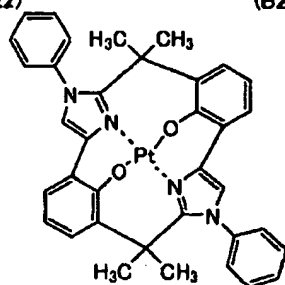


(B21)

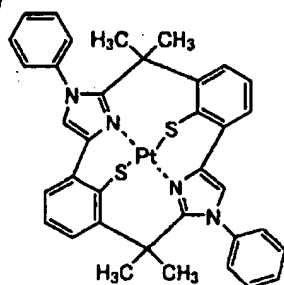


30

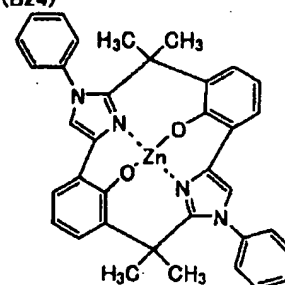
(B22)



(B23)



(B24)

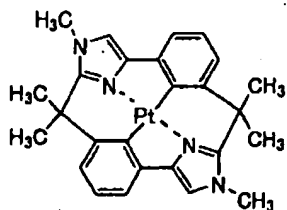


40

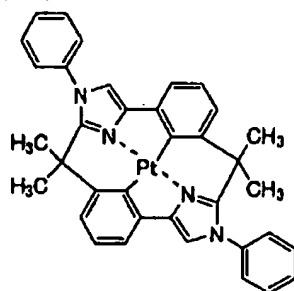
【 0 3 5 5 】

【化 9 5】

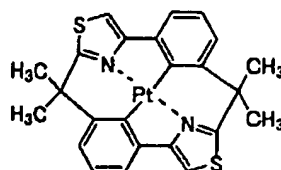
(B25)



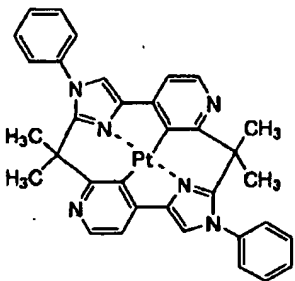
(B26)



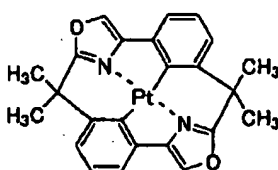
(B27)



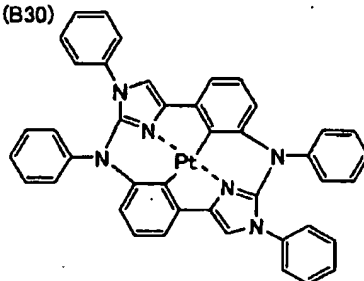
(B28)



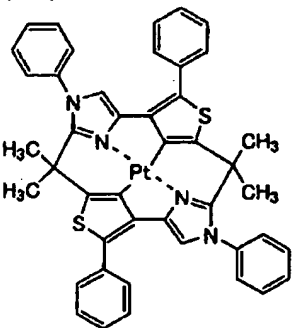
(B29)



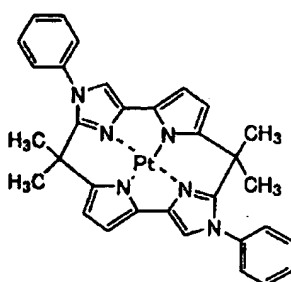
(B30)



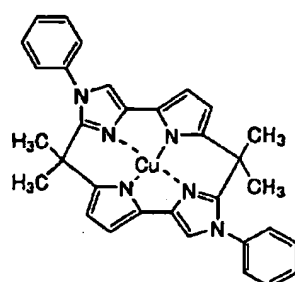
(B31)



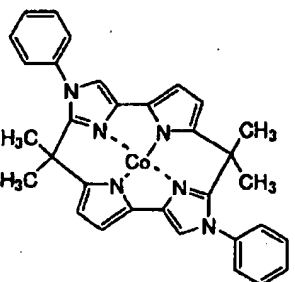
(B32)



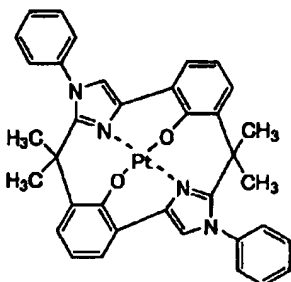
(B33)



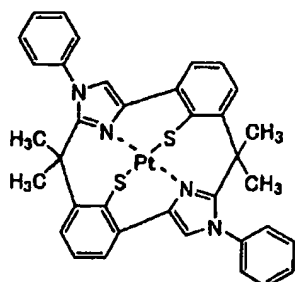
(B34)



(B35)



(B36)



【 0 3 5 6 】

10

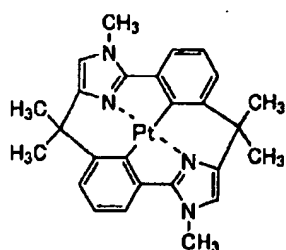
20

30

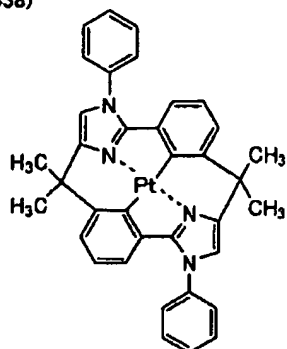
40

【化 9 6】

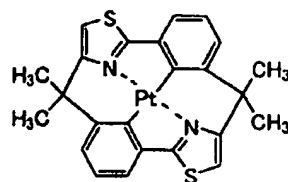
(B37)



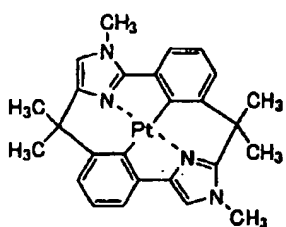
(B38)



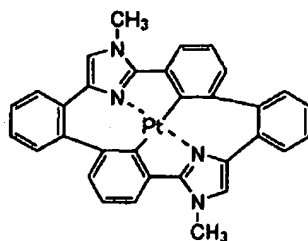
(B39)



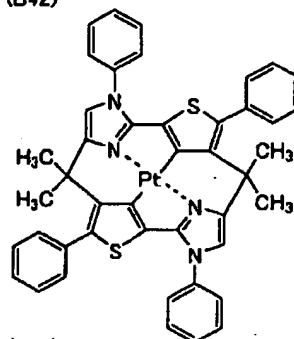
(B40)



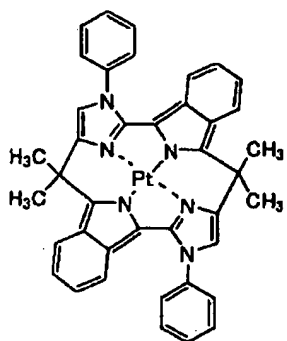
(B41)



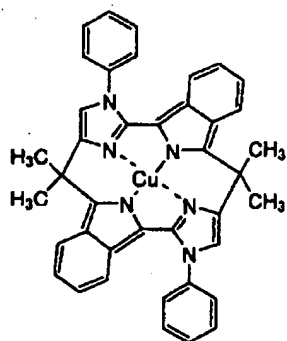
(B42)



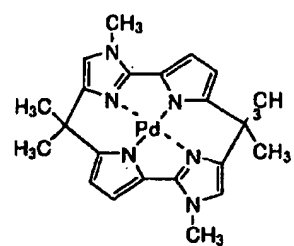
(B43)



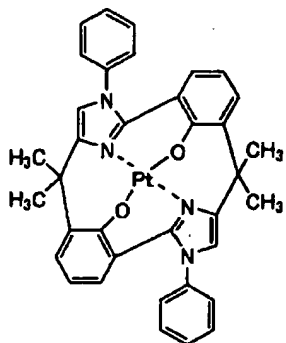
(B44)



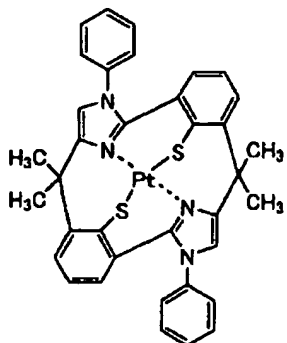
(B45)



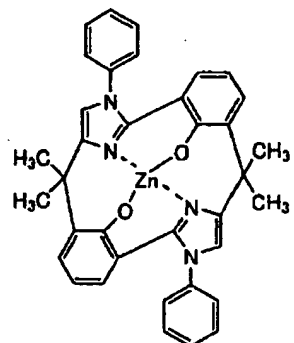
(B46)



(B47)



(B48)



【 0 3 5 7 】

10

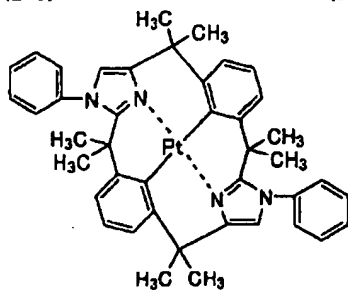
20

30

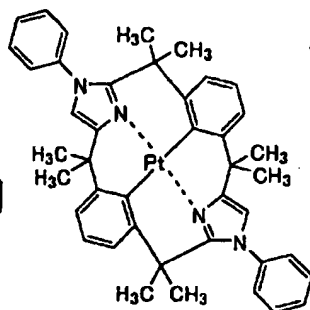
40

【化 9 7】

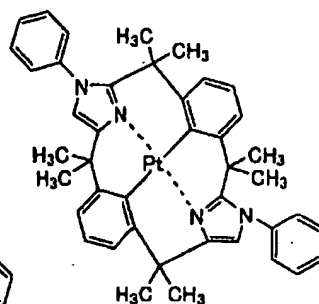
(B49)



(B50)

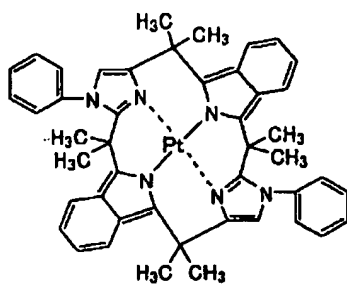


(B51)

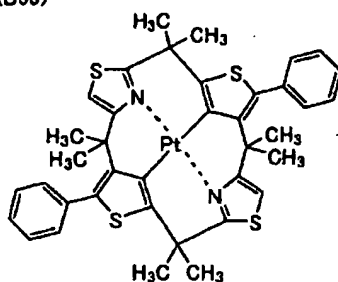


10

(B52)

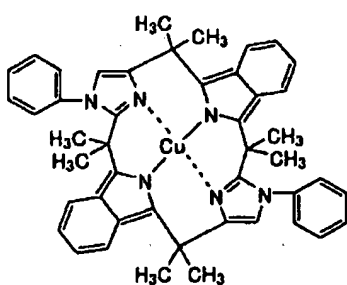


(B53)

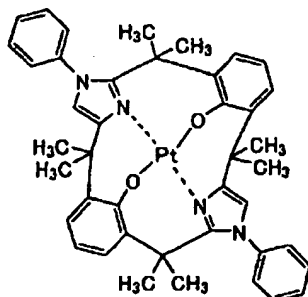


20

(B54)



(B55)



30

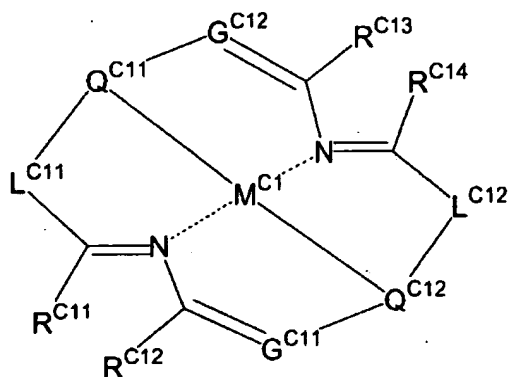
【 0 3 5 8】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、一般式 (C-1) で表される化合物である。

【 0 3 5 9】

【化 9 8】

一般式 (C-1)



10

【0360】

一般式 (C-1) 中、 M^{C1} は金属イオンを表す。 R^{C11} 、 R^{C12} は、それぞれ独立に、水素原子、互いに連結して五員環を形成する置換基、または互いに連結することの無い置換基を表す。 R^{C13} 、 R^{C14} は、それぞれ独立に、水素原子、互いに連結して五員環を形成する置換基、または互いに連結することの無い置換基を表す。 G^{C11} 、 G^{C12} は、それぞれ独立に、窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。 L^{C11} 、 L^{C12} は連結基を表す。 Q^{C11} 、 Q^{C12} は M^{C1} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

20

【0361】

一般式 (C-1) について詳細に説明する。

一般式 (C-1) 中、 M^{C1} 、 L^{C11} 、 L^{C12} 、 Q^{C11} 、 Q^{C12} はそれぞれ対応する一般式 (A-1) 中における、 M^{A1} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 Q^{A11} 、 Q^{A12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

G^{C11} 、 G^{C12} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは窒素原子、無置換の炭素原子であり、より好ましくは窒素原子である。

R^{C11} 、 R^{C12} はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 R^{C11} 、 R^{C12} は互いに連結して五員環を形成してもよい。 R^{C13} 、 R^{C14} はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 R^{C13} 、 R^{C14} は互いに連結して五員環を形成してもよい。

30

【0362】

R^{C11} 、 R^{C12} 、 R^{C13} および R^{C14} で表される置換基としては、アルキル基（好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～10 であり、例えばメチル、エチル、i s o-プロピル、t e r t-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、

40

【0363】

アリール基（好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、特に好ましくは炭素数 6～12 であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数 0～30、より好ましくは炭素数 0～20、特に好ましくは炭素数 0～10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシ基（好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリールオキシ基（好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、特に好ましくは炭素数 6～12 であり、例えば

50

フェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。）、

【0364】

ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。）、アシル基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニル基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。）、アリーロキシカルボニル基（好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。）、

10

【0365】

アシルオキシ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。）、アシルアミノ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、アリーロキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、

20

【0366】

アルキルチオ基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。）、アリールチオ基（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。）、ヘテロ環チオ基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。）、ハロゲン原子（例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）、シアノ基、

30

【0367】

ヘテロ環基（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子であり、具体的にはイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。）、シリル基（好ましくは炭素数3～40、より好ましくは炭素数3～30、特に好ましくは炭素数3～24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。）、シリルオキシ基（好ましくは炭素数3～40、より好ましくは炭素数3～30、特に好ましくは炭素数3～24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。）などが挙げられる。

40

【0368】

R^{C11} 、 R^{C12} 、 R^{C13} および R^{C14} で表される置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、 R^{C11} と R^{C12} 、 R^{C13} と R^{C14} が互いに結合して五員環を形成する基であり、特に好ましくは R^{C11} と R^{C12} 、 R^{C13} と R^{C14} が互いに結合して五員環を形成する基である。

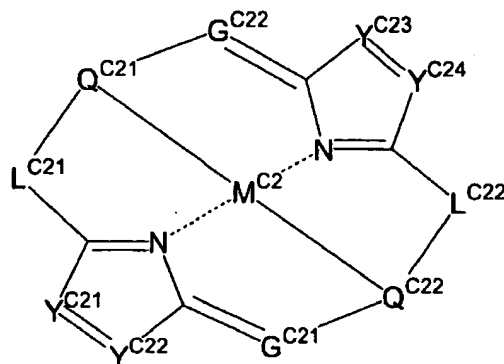
【0369】

一般式（C-1）で表される化合物は、より好ましくは一般式（C-2）で表される化合物である。

【0370】

【化 9 9】

一般式 (C-2)



10

【0371】

一般式 (C-2) 中、 M^{C2} は金属イオンを表す。

Y^{C21} 、 Y^{C22} 、 Y^{C23} および Y^{C24} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 G^{C21} 、 G^{C22} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 L^{C21} 、 L^{C22} は連結基を表す。 Q^{C21} 、 Q^{C22} は M^{C2} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

【0372】

一般式 (C-2) について詳細に説明する。

一般式 (C-2) 中、 M^{C2} 、 L^{C21} 、 L^{C22} 、 Q^{C21} 、 Q^{C22} 、 G^{C21} 、 G^{C22} はそれぞれ対応する、一般式 (C-1) における M^{C1} 、 L^{C11} 、 L^{C12} 、 Q^{C11} 、 Q^{C12} 、 G^{C11} 、 G^{C12} と同義であり、好ましい範囲も同様である。

20

Y^{C21} 、 Y^{C22} 、 Y^{C23} および Y^{C24} は、それぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

【0373】

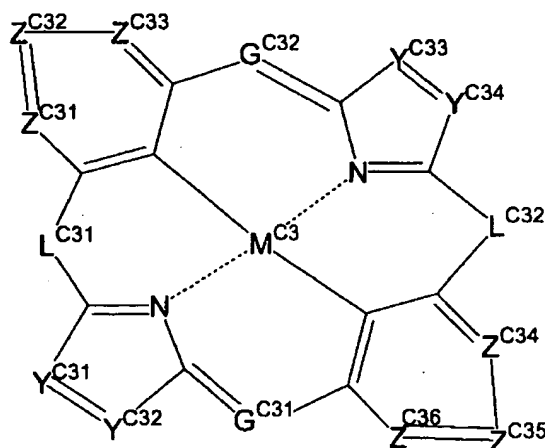
一般式 (C-2) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (C-3)、一般式 (C-4) 又は一般式 (C-5) で表される化合物である。

【0374】

30

【化 100】

一般式 (C-3)



40

【0375】

一般式 (C-3) 中、 M^{C3} は金属イオンを表す。

Y^{C31} 、 Y^{C32} 、 Y^{C33} および Y^{C34} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 G^{C31} 、 G^{C32} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 L^{C31} 、 L^{C32} は連結基を表す。 Z^{C31} 、 Z^{C32} 、 Z^{C33} 、 Z^{C34} 、 Z^{C35} お

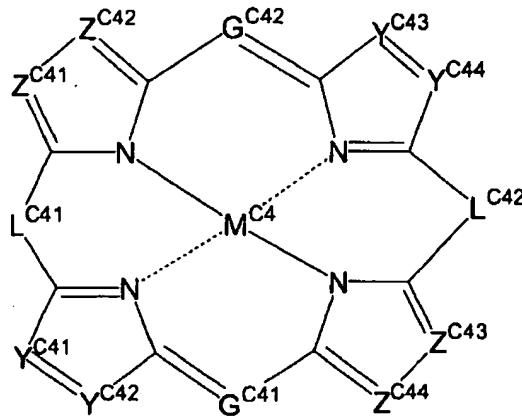
50

よび Z^{C36} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0376】

【化101】

一般式 (C-4)



10

【0377】

一般式 (C-4) 中、 M^{C4} は金属イオンを表す。

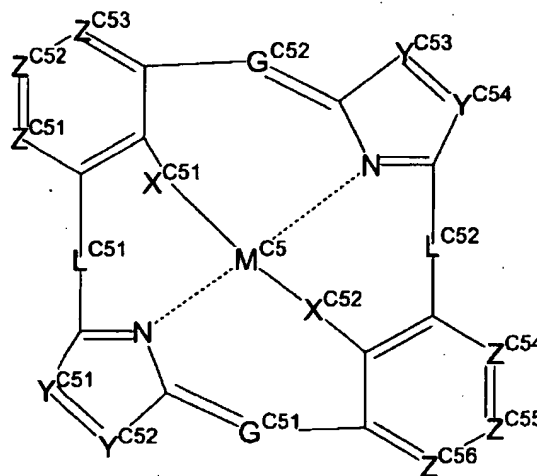
20

Y^{C41} 、 Y^{C42} 、 Y^{C43} および Y^{C44} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 G^{C41} 、 G^{C42} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 L^{C41} 、 L^{C42} は連結基を表す。 Z^{C41} 、 Z^{C42} 、 Z^{C43} および Z^{C44} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0378】

【化102】

一般式 (C-5)



30

40

【0379】

一般式 (C-5) 中、 M^{C5} は金属イオンを表す。

Y^{C51} 、 Y^{C52} 、 Y^{C53} および Y^{C54} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 G^{C51} 、 G^{C52} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 L^{C51} 、 L^{C52} は連結基を表す。 Z^{C51} 、 Z^{C52} 、 Z^{C53} 、 Z^{C54} 、 Z^{C55} および Z^{C56} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 X^{C51} 、 X^{C52} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【0380】

50

一般式 (C-3) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (C-3) 中、 M^{C3} 、 L^{C31} 、 L^{C32} 、 G^{C31} 、 G^{C32} はそれぞれ対応する、一般式 (C-1) における、 M^{C1} 、 L^{C11} 、 L^{C12} 、 G^{C11} 、 G^{C12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{C31} 、 Z^{C32} 、 Z^{C33} 、 Z^{C34} 、 Z^{C35} および Z^{C36} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{C31} 、 Z^{C32} 、 Z^{C33} 、 Z^{C34} 、 Z^{C35} および Z^{C36} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

【0381】

一般式 (C-4) で表される化合物について詳細に説明する。

10

一般式 (C-4) 中、 M^{C4} 、 L^{C41} 、 L^{C42} 、 G^{C41} 、 G^{C42} は、それぞれ対応する一般式 (C-1) における、 M^{C1} 、 L^{C11} 、 L^{C12} 、 G^{C11} 、 G^{C12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{C41} 、 Z^{C42} 、 Z^{C43} 、および Z^{C44} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{C41} 、 Z^{C42} 、 Z^{C43} 、および Z^{C44} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

【0382】

一般式 (C-5) で表される化合物について詳細に説明する。

M^{C5} 、 L^{C51} 、 L^{C52} 、 G^{C51} 、 G^{C52} は、それぞれ対応する一般式 (C-1) における、 M^{C1} 、 L^{C11} 、 L^{C12} 、 G^{C11} 、 G^{C12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

Z^{C51} 、 Z^{C52} 、 Z^{C53} 、 Z^{C54} 、 Z^{C55} および Z^{C56} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{C51} 、 Z^{C52} 、 Z^{C53} 、 Z^{C54} 、 Z^{C55} および Z^{C56} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

X^{C51} 、 X^{C52} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 X^{C51} 、 X^{C52} として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

【0383】

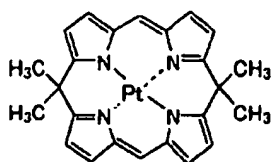
一般式 (C-1) で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

30

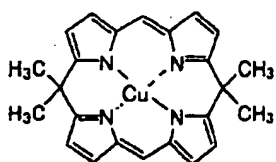
【0384】

【化 1 0 3】

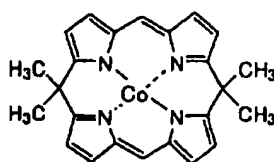
(C1)



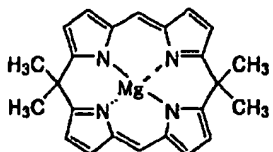
(C2)



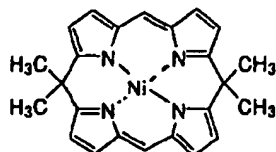
(C3)



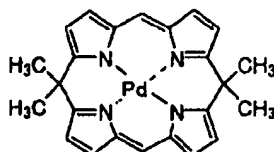
(C4)



(C5)

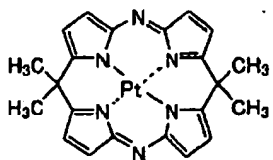


(C6)

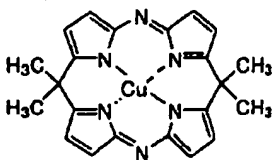


10

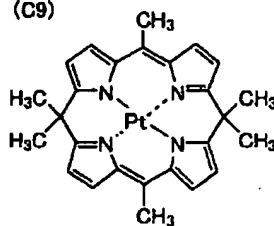
(C7)



(C8)

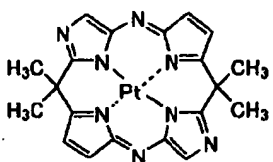


(C9)

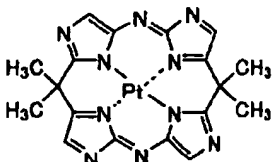


20

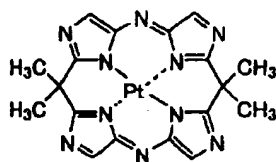
(C10)



(C11)

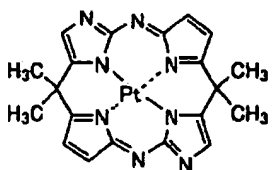


(C12)

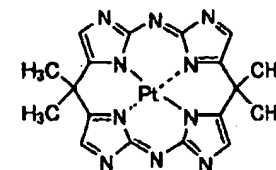


30

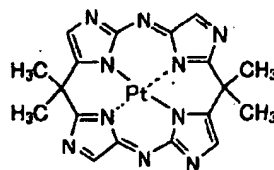
(C13)



(C14)



(C15)

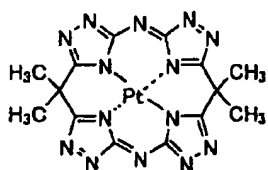


40

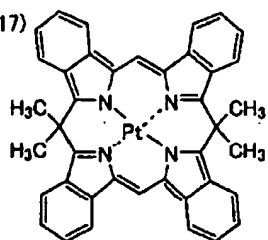
【 0 3 8 5】

【化 1 0 4】

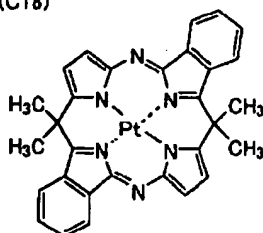
(C16)



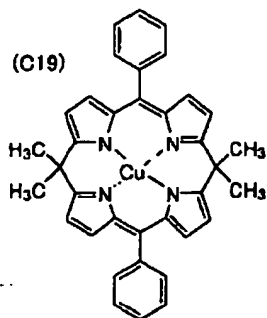
(C17)



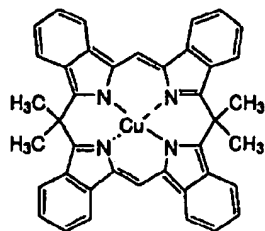
(C18)



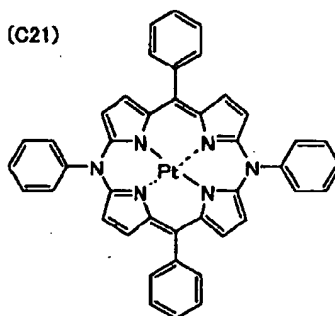
(C19)



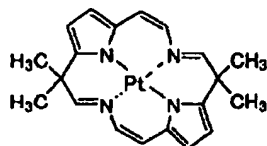
(C20)



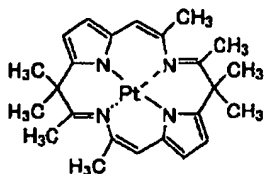
(C21)



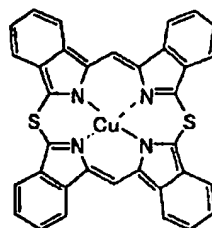
(C22)



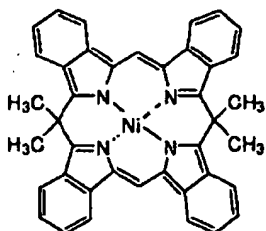
(C23)



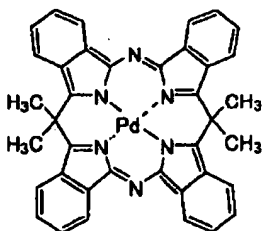
(C24)



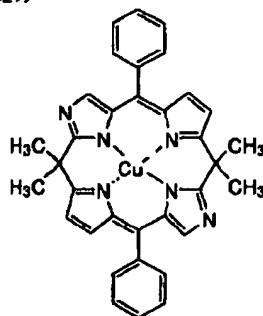
(C25)



(C26)



(C27)



【 0 3 8 6 】

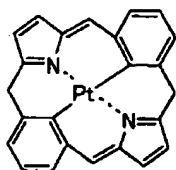
10

20

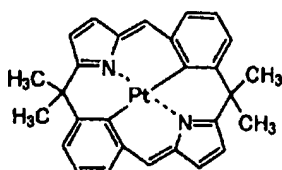
30

【化 1 0 5】

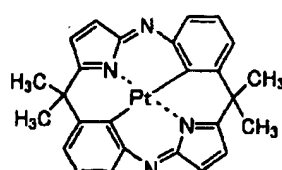
(C28)



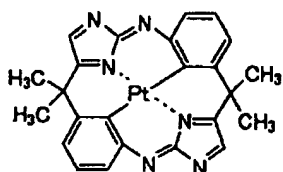
(C29)



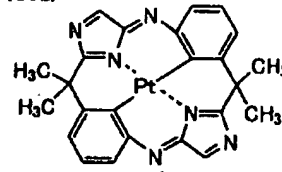
(C30)



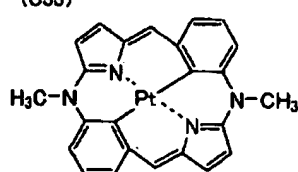
(C31)



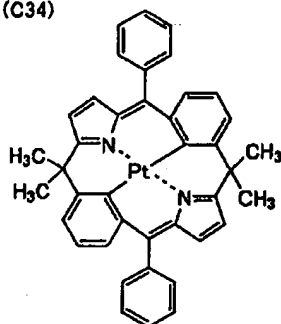
(C32)



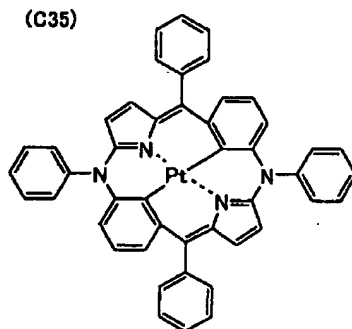
(C33)



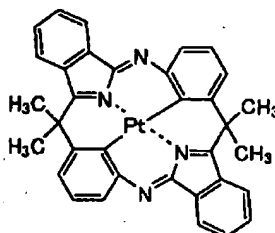
(C34)



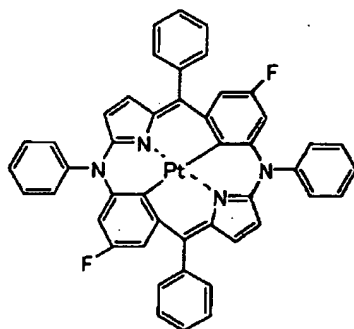
(C35)



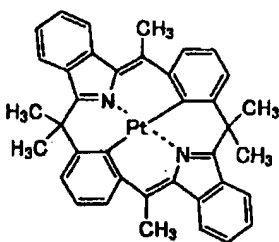
(C36)



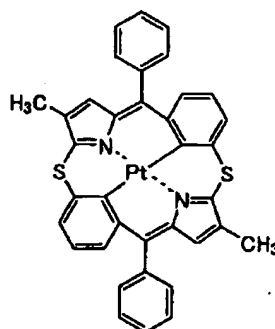
(C37)



(C38)



(C39)



【 0 3 8 7】

10

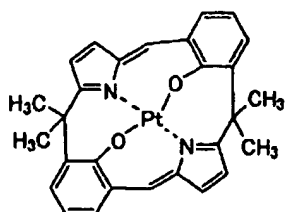
20

30

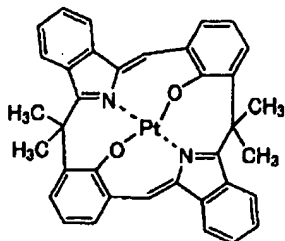
40

【化 1 0 6】

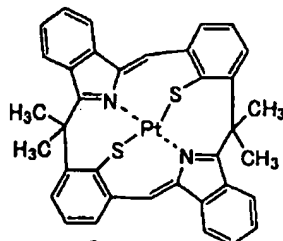
(C40)



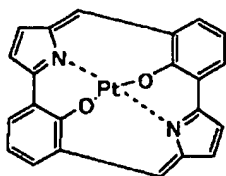
(C41)



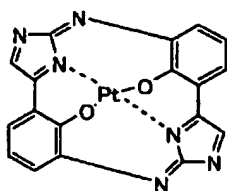
(C42)



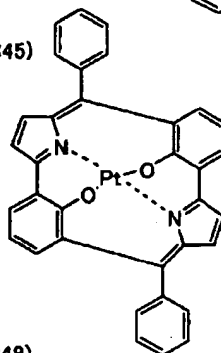
(C43)



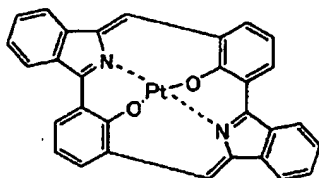
(C44)



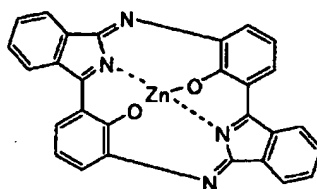
(C45)



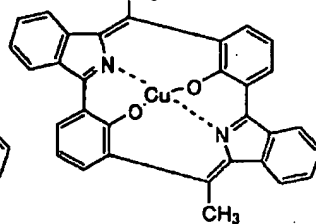
(C46)



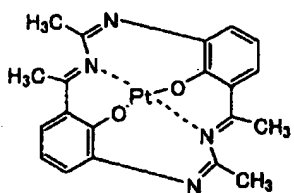
(C47)



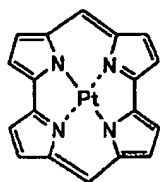
(C48)



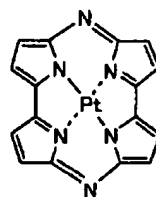
(C49)



(C50)



(C51)



10

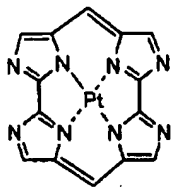
20

30

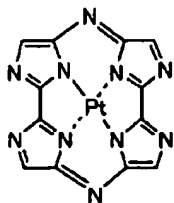
【 0 3 8 8】

【化 1 0 7】

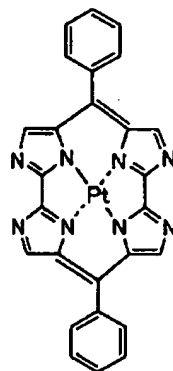
(C52)



(C53)

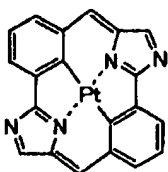


(C54)

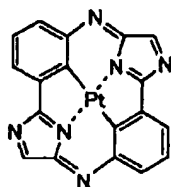


10

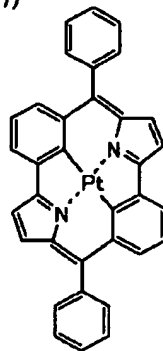
(C55)



(C56)

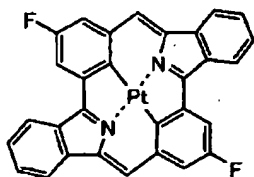


(C57)

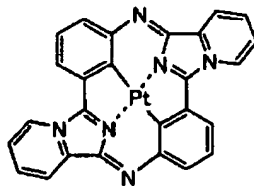


20

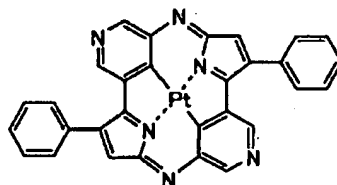
(C58)



(C59)

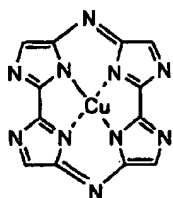


(C60)

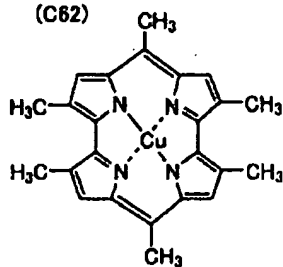


30

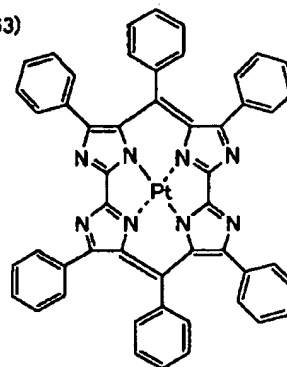
(C61)



(C62)



(C63)



40

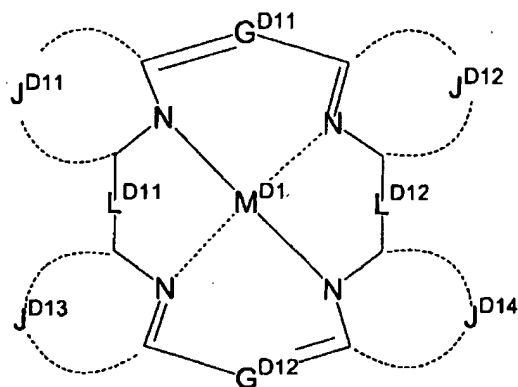
【0389】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式 (D-1) で表される化合物である。

【0390】

【化108】

一般式 (D-1)



10

【0391】

一般式 (D-1) 中、 M^{D1} は金属イオンを表す。

G^{D11} 、 G^{D12} は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。 J^{D11} 、 J^{D12} 、 J^{D13} および J^{D14} は五員環を形成するのに必要な原子群を表す。 L^{D11} 、 L^{D12} は連結基を表す。

【0392】

20

一般式 (D-1) について詳細に説明する。

一般式 (D-1) 中、 M^{D1} 、 L^{D11} 、 L^{D12} はそれぞれ対応する一般式 (A-1) 中における、 M^{A1} 、 L^{A11} 、 L^{A12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

G^{D11} 、 G^{D12} は、それぞれ対応する一般式 (C-1) における G^{C11} 、 G^{C12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

J^{D11} 、 J^{D12} 、 J^{D13} および J^{D14} は、これらが結合している原子群と共に、含窒素ヘテロ五員環を形成するのに必要な原子群を表す。

【0393】

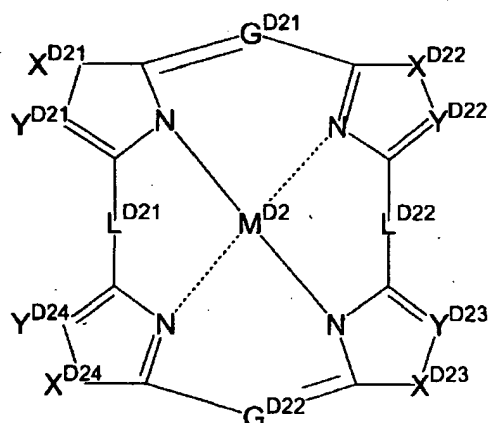
一般式 (D-1) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (D-2)、一般式 (D-3)、又は一般式 (D-4) で表される化合物である。

30

【0394】

【化109】

一般式 (D-2)



40

【0395】

一般式 (D-2) 中、 M^{D2} は金属イオンを表す。

G^{D21} 、 G^{D22} は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

Y^{D21} 、 Y^{D22} 、 Y^{D23} および Y^{D24} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

50

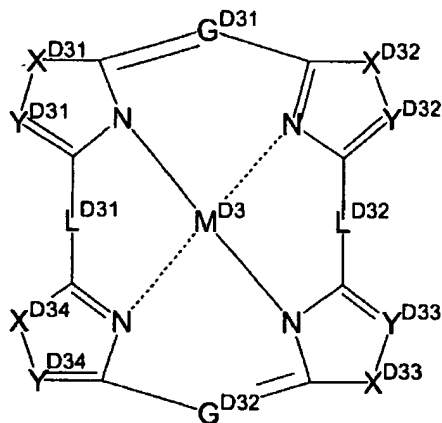
X^{D21} 、 X^{D22} 、 X^{D23} および X^{D24} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D21}$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}-$ を表す。

R^{D21} 、 R^{D22} および R^{D23} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 L^{D21} 、 L^{D22} は連結基を表す。

【0396】

【化110】

一般式 (D-3)



10

【0397】

一般式 (D-3) 中、 M^{D3} は金属イオンを表す。

G^{D31} 、 G^{D32} は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

Y^{D31} 、 Y^{D32} 、 Y^{D33} および Y^{D34} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

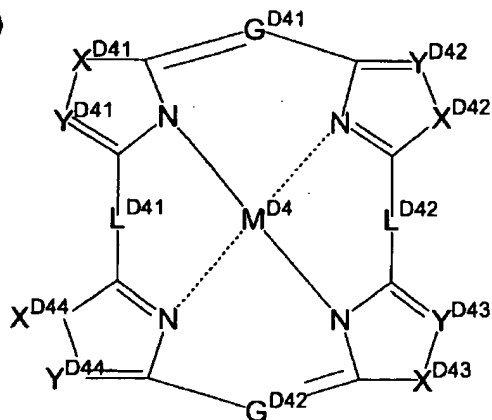
X^{D31} 、 X^{D32} 、 X^{D33} および X^{D34} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D31}$ 、 $-C(R^{D32})R^{D33}-$ を表す。

R^{D31} 、 R^{D32} および R^{D33} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 L^{D31} 、 L^{D32} は連結基を表す。

【0398】

【化111】

一般式 (D-4)



40

【0399】

一般式 (D-4) 中、 M^{D4} は金属イオンを表す。

G^{D41} 、 G^{D42} は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

Y^{D41} 、 Y^{D42} 、 Y^{D43} および Y^{D44} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

X^{D41} 、 X^{D42} 、 X^{D43} および X^{D44} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D41}$ 、 $-C(R^{D42})R^{D43}-$ を表す。 R^{D41} 、 R^{D42} および R^{D43} は、それぞれ独立に水素原

50

子または置換基を表す。 L^{D41} 、 L^{D42} は連結基を表す。

【0400】

一般式 (D-2) について詳細に説明する。

M^{D2} 、 L^{D21} 、 L^{D22} 、 G^{D21} 、 G^{D22} は、一般式 (D-1) における M^{D1} 、 L^{D11} 、 L^{D12} 、 G^{D11} 、 G^{D12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Y^{D21} 、 Y^{D22} 、 Y^{D23} および Y^{D24} は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

X^{D21} 、 X^{D22} 、 X^{D23} および X^{D24} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D21}$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}$ を表し、好ましくは硫黄原子、 $-NR^{D21}$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}$ であり、より好ましくは $-NR^{D21}$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}$ であり、さらに好ましくは $-NR^{D21}$ である。

R^{D21} 、 R^{D22} および R^{D23} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 R^{D21} 、 R^{D22} および R^{D23} で表される置換基としては、アルキル基（好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~12、特に好ましくは炭素数1~8であり、例えばメチル、エチル、i s o -プロピル、t e r t -ブチル、n -オクチル、n -デシル、n -ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル等が挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニル等が挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニル等が挙げられる。）

【0401】

アリール基（好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、ナフチル等が挙げられる。）、置換カルボニル基（好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、メトキシカルボニル、フェニルオキシカルボニル、ジメチルアミノカルボニル、フェニルアミノカルボニル、等が挙げられる。）、置換スルホニル基（好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシル等が挙げられる。）、

【0402】

ヘテロ環基（脂肪族ヘテロ環基、芳香族ヘテロ環基がある。好ましくは、酸素原子、硫黄原子、窒素原子のいずれかを含み、好ましくは炭素数1~50、より好ましくは炭素数1~30、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばイミダゾリル、ピリジル、フリル、ピペリジル、モルホリノ、ベンゾオキサゾリル、トリアゾリル基等が挙げられる。）等が挙げられる。 R^{D21} 、 R^{D22} および R^{D23} は好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基であり、さらに好ましくはアリール基である。

【0403】

一般式 (D-3) について詳細に説明する。

一般式 (D-3) 中、 M^{D3} 、 L^{D31} 、 L^{D32} 、 G^{D31} 、 G^{D32} は、それぞれ対応する一般式 (D-1) における M^{D1} 、 L^{D11} 、 L^{D12} 、 G^{D11} 、 G^{D12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

X^{D31} 、 X^{D32} 、 X^{D33} および X^{D34} はそれぞれ対応する、一般式 (D-2) における X^{D21} 、 X^{D22} 、 X^{D23} および X^{D24} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Y^{D31} 、 Y^{D32} 、 Y^{D33} および Y^{D34} はそれぞれ対応する、一般式 (D-2) における Y^{D21} 、 Y^{D22} 、 Y^{D23} および Y^{D24} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0404】

一般式 (D-4) について詳細に説明する。

10

20

30

40

50

一般式 (D-4) 中、 M^{D4} 、 L^{D41} 、 L^{D42} 、 G^{D41} 、 G^{D42} は、それぞれ対応する、一般式 (D-1) における M^{D1} 、 L^{D11} 、 L^{D12} 、 G^{D11} 、 G^{D12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

X^{D41} 、 X^{D42} 、 X^{D43} および X^{D44} は、それぞれ対応する一般式 (D-2) における X^{D21} 、 X^{D22} 、 X^{D23} および X^{D24} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 Y^{D41} 、 Y^{D42} 、 Y^{D43} および Y^{D44} は、それぞれ対応する、一般式 (D-2) における Y^{D21} 、 Y^{D22} 、 Y^{D23} および Y^{D24} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

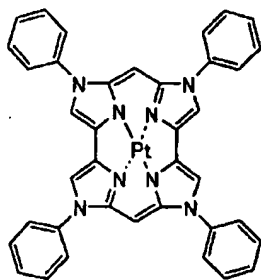
【0405】

一般式 (D-1) で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

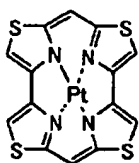
【0406】

【化 1 1 2】

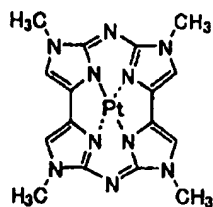
(D1)



(D2)

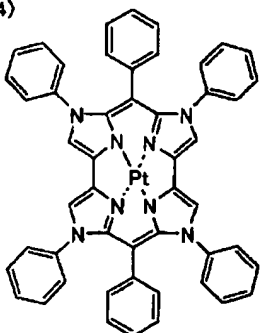


(D3)

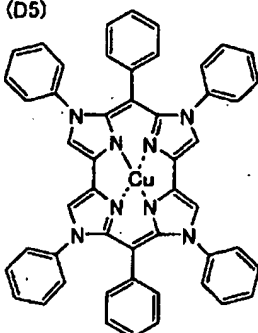


10

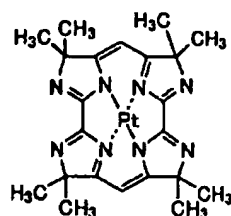
(D4)



(D5)

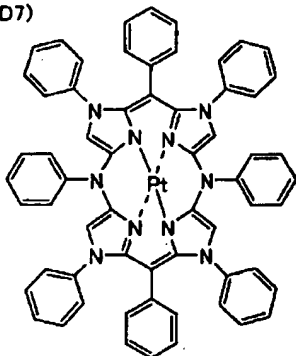


(D6)

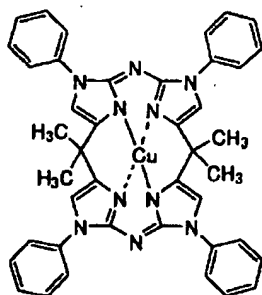


20

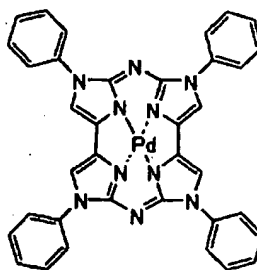
(D7)



(D8)

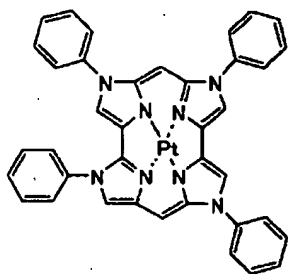


(D9)

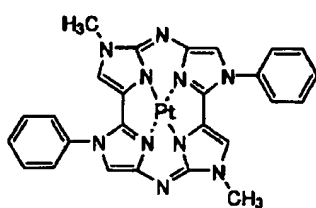


30

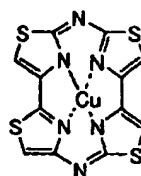
(D10)



(D11)



(D12)

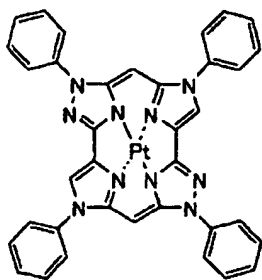


40

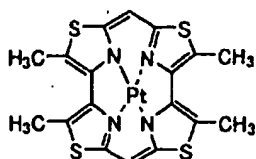
【 0 4 0 7 】

【化 1 1 3】

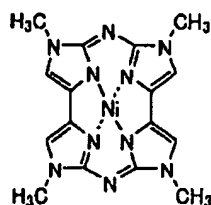
(D13)



(D14)

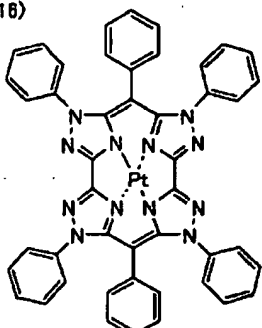


(D15)

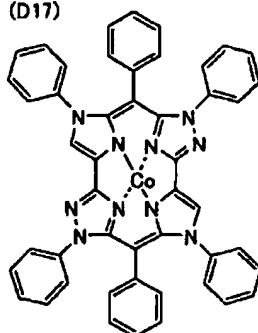


10

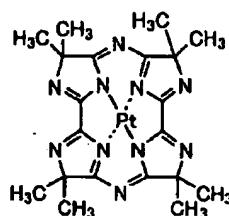
(D16)



(D17)

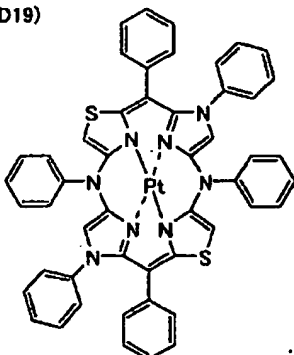


(D18)

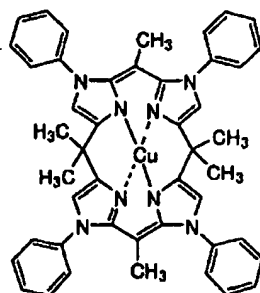


20

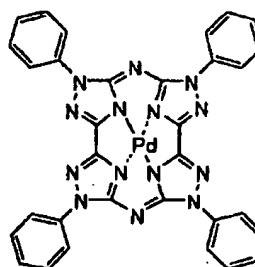
(D19)



(D20)

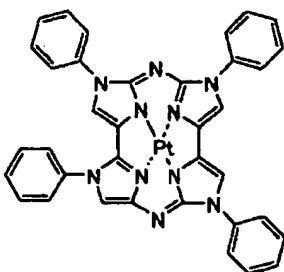


(D21)

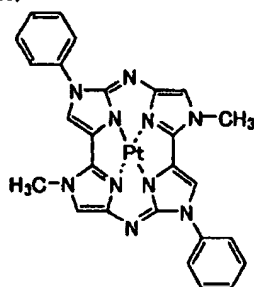


30

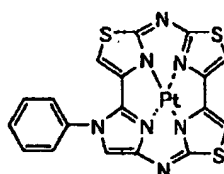
(D22)



(D23)



(D24)



40

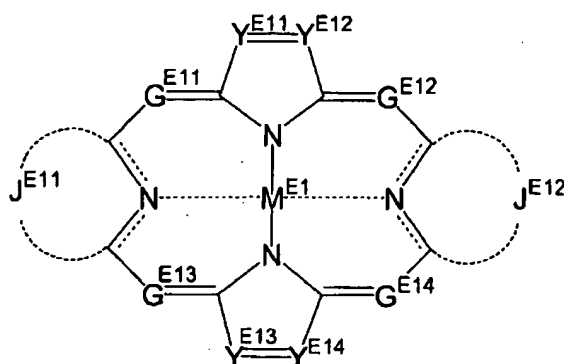
【0408】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式(E-1)で表される化合物である。

【0409】

【化 1 1 4】

一般式 (E-1)



10

【0 4 1 0】

一般式 (E-1) 中、 M^{E1} は金属イオンを表す。 J^{E11} 、 J^{E12} は五員環を形成するのに必要な原子群を表す。 G^{E11} 、 G^{E12} 、 G^{E13} および G^{E14} は、それぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Y^{E11} 、 Y^{E12} 、 Y^{E13} および Y^{E14} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0 4 1 1】

一般式 (E-1) について詳細に説明する。

一般式 (E-1) 中、 M^{E1} は一般式 (A-1) における M^{A1} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 G^{E11} 、 G^{E12} 、 G^{E13} および G^{E14} は一般式 (C-1) における G^{C1} 、 G^{C12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

J^{E11} 、 J^{E12} は、一般式 (D-1) における $J^{D12} \sim J^{D14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 Y^{E11} 、 Y^{E12} 、 Y^{E13} および Y^{E14} はそれぞれ対応する、一般式 (C-2) における $Y^{C21} \sim Y^{C24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0 4 1 2】

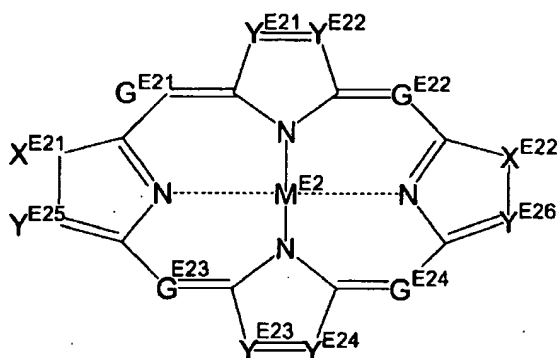
一般式 (E-1) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (E-2)、又は一般式 (E-3) で表される化合物である。

30

【0 4 1 3】

【化 1 1 5】

一般式 (E-2)



40

【0 4 1 4】

一般式 (E-2) 中、 M^{E2} は金属イオンを表す。 G^{E21} 、 G^{E22} 、 G^{E23} および G^{E24} はそれぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Y^{E21} 、 Y^{E22} 、 Y^{E23} 、 Y^{E24} 、 Y^{E25} および Y^{E26} はそれぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

X^{E21} および X^{E22} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{E21}-$ 、 $-C(R^{E22})-$

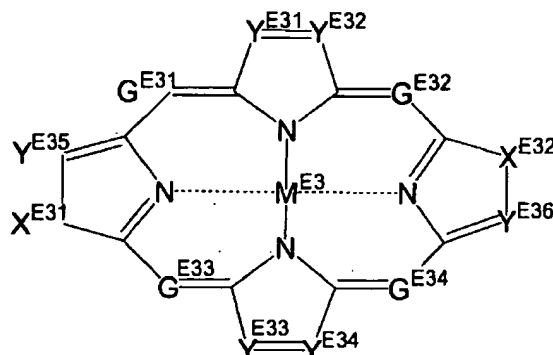
50

) R^{E23} —を表す。 R^{E21} 、 R^{E22} および R^{E23} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。

【0415】

【化116】

一般式 (E-3)



10

【0416】

一般式 (E-3) 中、 M^{E3} は金属イオンを表す。 J^{E31} 、 J^{E32} はそれぞれ独立に五員環を形成するのに必要な原子群を表す。 G^{E31} 、 G^{E32} 、 G^{E33} および G^{E34} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Y^{E31} 、 Y^{E32} 、 Y^{E33} 、 Y^{E34} 、 Y^{E35} および Y^{E36} はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 X^{E31} および X^{E32} は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{E31}-$ 、 $-C(R^{E32})R^{E33}-$ を表す。 R^{E31} 、 R^{E32} および R^{E33} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。

20

【0417】

一般式 (E-2) について詳細に説明する。

一般式 (E-2) 中、 M^{E2} 、 G^{E21} 、 G^{E22} 、 G^{E23} 、 G^{E24} 、 Y^{E21} 、 Y^{E22} 、 Y^{E23} 、 Y^{E24} は、それぞれ対応する一般式 (E-1) における M^{E1} 、 G^{E11} 、 G^{E12} 、 G^{E13} 、 G^{E14} 、 Y^{E11} 、 Y^{E12} 、 Y^{E13} 、 Y^{E14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 X^{E21} 、 X^{E22} は一般式 (D-2) における X^{D21} 、 X^{D22} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

30

【0418】

一般式 (E-3) について詳細に説明する。

一般式 (E-3) 中、 M^{E3} 、 G^{E31} 、 G^{E32} 、 G^{E33} 、 G^{E34} 、 Y^{E31} 、 Y^{E32} 、 Y^{E33} 、 Y^{E34} は、それぞれ対応する、一般式 (E-1) における M^{E1} 、 G^{E11} 、 G^{E12} 、 G^{E13} 、 G^{E14} 、 Y^{E11} 、 Y^{E12} 、 Y^{E13} 、 Y^{E14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 X^{E31} 、 X^{E32} は対応する、一般式 (E-2) における X^{E21} 、 X^{E22} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0419】

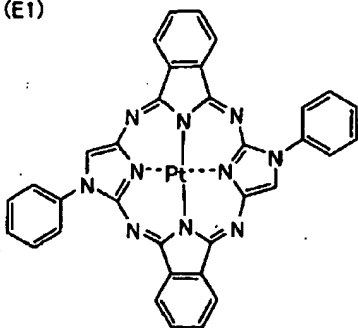
一般式 (E-1) で表される化合物の具体例を以下に列举するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

40

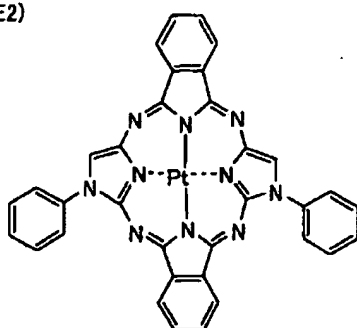
【0420】

【化 1 1 7】

(E1)

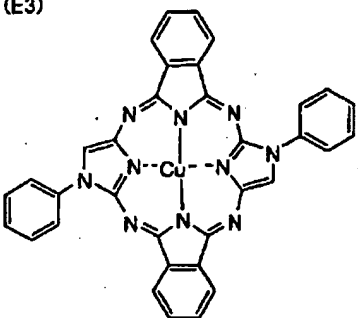


(E2)

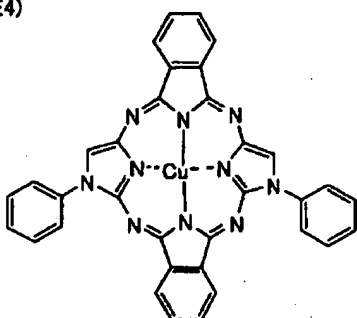


10

(E3)

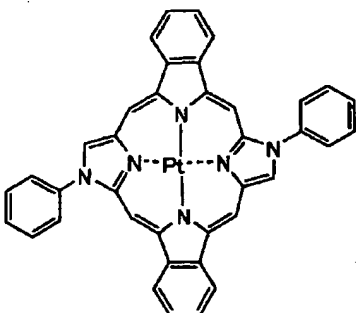


(E4)

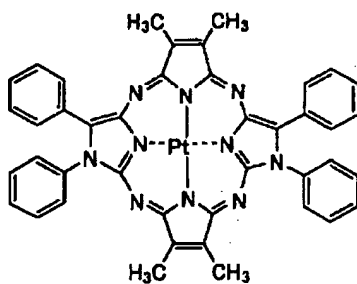


20

(E5)

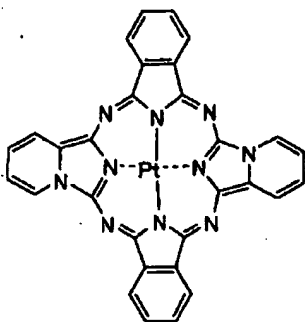


(E6)

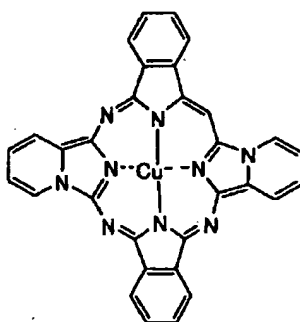


30

(E7)



(E8)

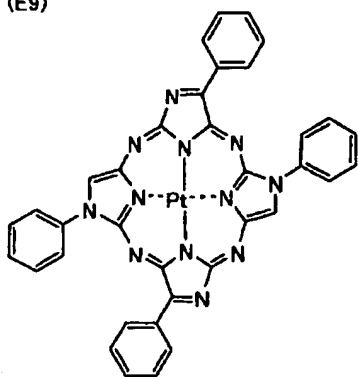


40

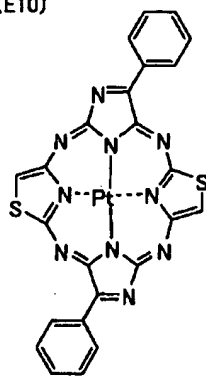
【 0 4 2 1】

【化 1 1 8】

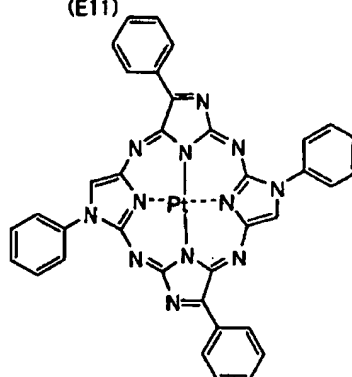
(E9)



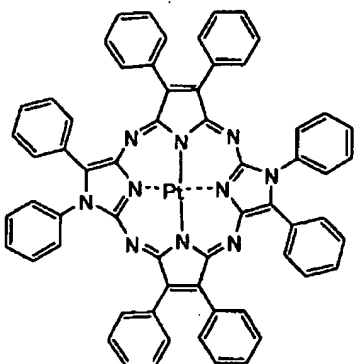
(E10)



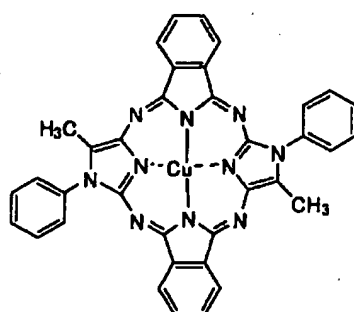
(E11)



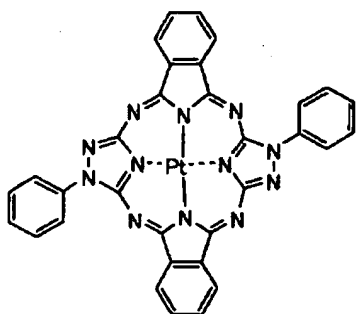
(E12)



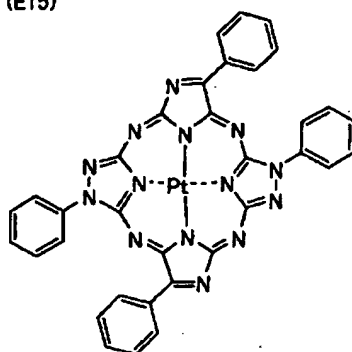
(E13)



(E14)



(E15)



【 0 4 2 2】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式 (F-1) で表される化合物である。

【 0 4 2 3】

10

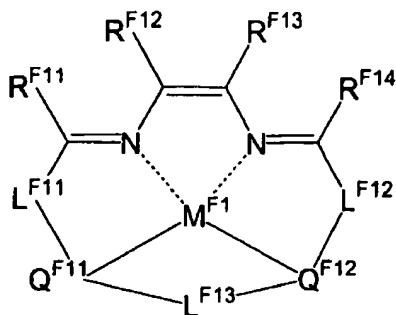
20

30

40

【化 1 1 9】

一般式 (F-1)



10

【 0 4 2 4 】

一般式 (F-1) 中、 M^{F1} は金属イオンを表す。 L^{F11} 、 L^{F12} および L^{F13} は連結基を表す。 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、 R^{F11} と R^{F12} 、 R^{F12} と R^{F13} 、 R^{F13} と R^{F14} は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、 R^{F11} と R^{F12} 、 R^{F13} と R^{F14} が形成する環は五員環である。 Q^{F11} 、 Q^{F12} は M^{F1} に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

【 0 4 2 5 】

一般式 (F-1) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (F-1) 中、 M^{F1} 、 L^{F11} 、 L^{F12} 、 L^{F13} 、 Q^{F11} 、 Q^{F12} はそれぞれ対応する、一般式 (A-1) における M^{A1} 、 L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 Q^{A11} 、 Q^{A12} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表し、 R^{F11} と R^{F12} 、 R^{F12} と R^{F13} 、 R^{F13} と R^{F14} は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、 R^{F11} と R^{F12} 、 R^{F13} と R^{F14} が形成する環は五員環である。 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} で表される置換基としては、それぞれ対応する一般式 (C-1) における $R^{C11} \sim R^{C14}$ で表される置換基として挙げたものが適用できる。 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} として好ましくは、 R^{F11} と R^{F12} 、 R^{F13} と R^{F14} が互いに結合して五員環を形成する基もしくは、 R^{F12} と R^{F13} が互いに結合して芳香環を形成する基である。

20

30

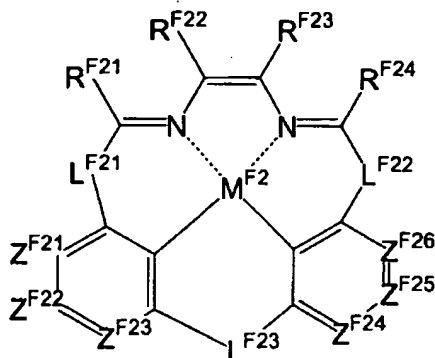
【 0 4 2 6 】

一般式 (F-1) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (F-2)、一般式 (F-3)、又は一般式 (F-4) で表される化合物である。

【 0 4 2 7 】

【化 1 2 0】

一般式 (F-2)



40

【 0 4 2 8 】

一般式 (F-2) 中、 M^{F2} は金属イオンを表す。 L^{F21} 、 L^{F22} および L^{F23} は連結基を

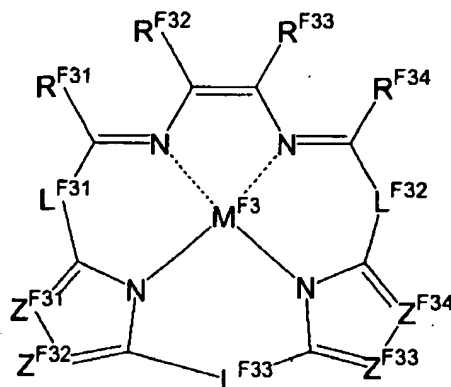
50

表す。 R^{F21} 、 R^{F22} 、 R^{F23} および R^{F24} は置換基を表し、 R^{F21} と R^{F22} 、 R^{F22} と R^{F23} 、 R^{F23} と R^{F24} は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、 R^{F21} と R^{F22} 、 R^{F23} と R^{F24} が形成する環は五員環である。 Z^{F21} 、 Z^{F22} 、 Z^{F23} 、 Z^{F24} 、 Z^{F25} および Z^{F26} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0429】

【化121】

一般式 (F-3)



10

【0430】

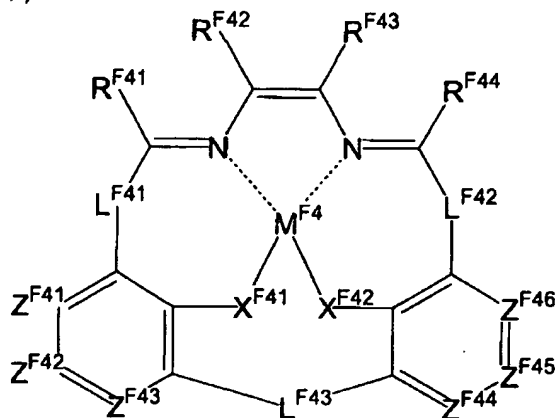
一般式 (F-3) 中、 M^{F3} は金属イオンを表す。 L^{F31} 、 L^{F32} および L^{F33} は連結基を表す。 R^{F31} 、 R^{F32} 、 R^{F33} および R^{F34} は置換基を表し、 R^{F31} と R^{F32} 、 R^{F32} と R^{F33} 、 R^{F33} と R^{F34} は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、 R^{F31} と R^{F32} 、 R^{F33} と R^{F34} が形成する環は五員環である。 Z^{F31} 、 Z^{F32} 、 Z^{F33} および Z^{F34} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

20

【0431】

【化122】

一般式 (F-4)



30

40

【0432】

一般式 (F-4) 中、 M^{F4} は金属イオンを表す。 L^{F41} 、 L^{F42} および L^{F43} は連結基を表す。 R^{F41} 、 R^{F42} 、 R^{F43} および R^{F44} は置換基を表し、 R^{F41} と R^{F42} 、 R^{F42} と R^{F43} 、 R^{F43} と R^{F44} は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、 R^{F41} と R^{F42} 、 R^{F43} と R^{F44} が形成する環は五員環である。 Z^{F41} 、 Z^{F42} 、 Z^{F43} 、 Z^{F44} 、 Z^{F45} 、および Z^{F46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 X^{F41} 、 X^{F42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【0433】

50

一般式 (F-2) で表される化合物について詳細に説明する。

M^{F2} 、 L^{F21} 、 L^{F22} 、 L^{F23} 、 R^{F21} 、 R^{F22} 、 R^{F23} および R^{F24} はそれぞれ対応する一般式 (F-1) における M^{F1} 、 L^{F11} 、 L^{F12} 、 L^{F13} 、 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{F21} 、 Z^{F22} 、 Z^{F23} 、 Z^{F24} 、 Z^{F25} および Z^{F26} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{F21} 、 Z^{F22} 、 Z^{F23} 、 Z^{F24} 、 Z^{F25} および Z^{F26} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0434】

10

一般式 (F-3) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (F-3) 中、 M^{F3} 、 L^{F31} 、 L^{F32} 、 L^{F33} 、 R^{F31} 、 R^{F32} 、 R^{F33} および R^{F34} はそれぞれ対応する、一般式 (F-1) における M^{F1} 、 L^{F11} 、 L^{F12} 、 L^{F13} 、 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 Z^{F31} 、 Z^{F32} 、 Z^{F33} および Z^{F34} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{F31} 、 Z^{F32} 、 Z^{F33} および Z^{F34} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0435】

20

一般式 (F-4) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (F-4) 中、 M^{F4} 、 L^{F41} 、 L^{F42} 、 L^{F43} 、 R^{F41} 、 R^{F42} 、 R^{F43} および R^{F44} は一般式 (F-1) における M^{F1} 、 L^{F11} 、 L^{F12} 、 L^{F13} 、 R^{F11} 、 R^{F12} 、 R^{F13} および R^{F14} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{F41} 、 Z^{F42} 、 Z^{F43} 、 Z^{F44} 、 Z^{F45} および Z^{F46} はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 Z^{F41} 、 Z^{F42} 、 Z^{F43} 、 Z^{F44} 、 Z^{F45} および Z^{F46} として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L^{A11} 、 L^{A12} 、 L^{A13} 、 L^{A14} で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

X^{F41} 、 X^{F42} はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 X^{F41} 、 X^{F42} として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

30

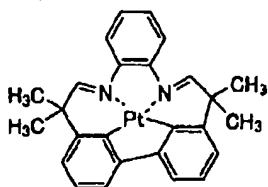
【0436】

一般式 (F-1) で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

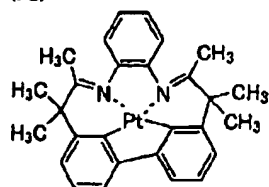
【0437】

【化 1 2 3】

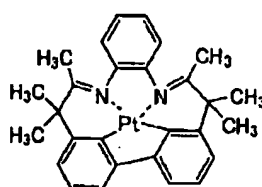
(F1)



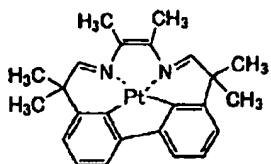
(F2)



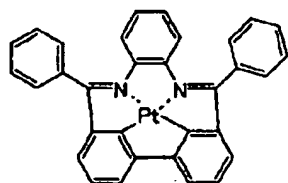
(F3)



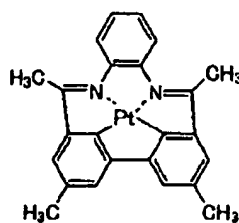
(F4)



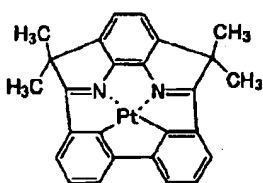
(F5)



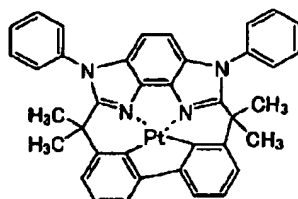
(F6)



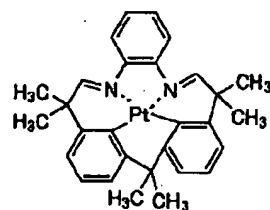
(F7)



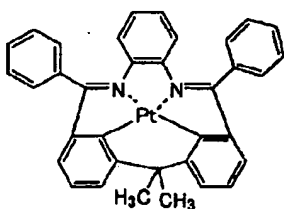
(F8)



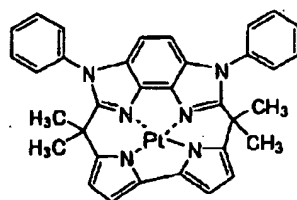
(F9)



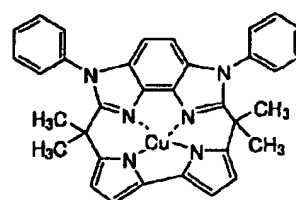
(F10)



(F11)



(F12)



10

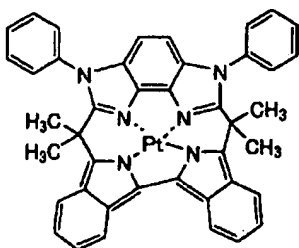
20

30

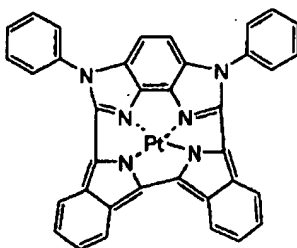
【 0 4 3 8 】

【化 1 2 4】

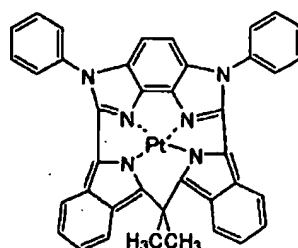
(F13)



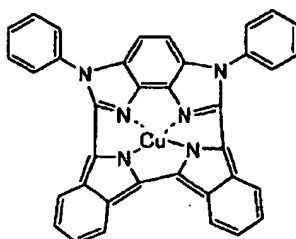
(F14)



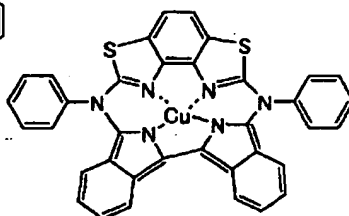
(F15)



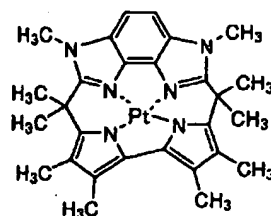
(F16)



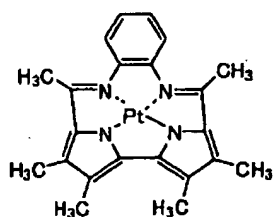
(F17)



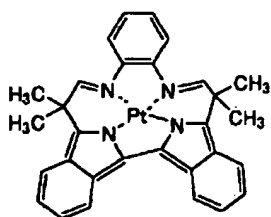
(F18)



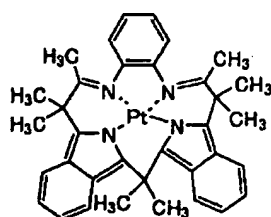
(F19)



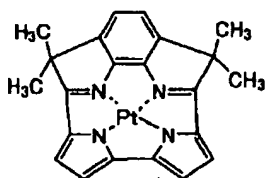
(F20)



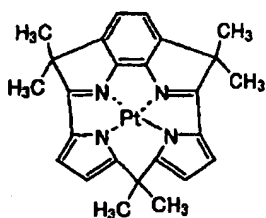
(F21)



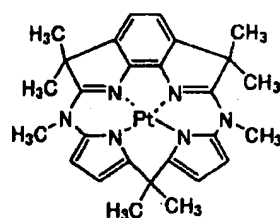
(F22)



(F23)



(F24)



【 0 4 3 9】

10

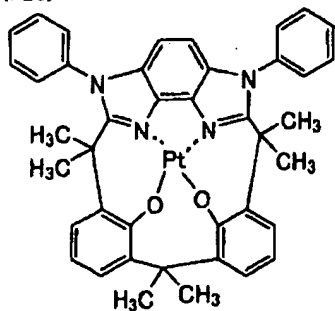
20

30

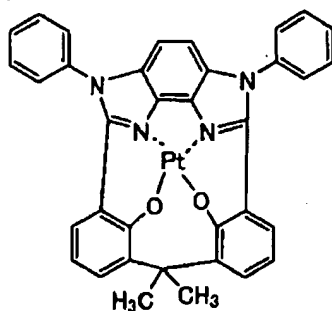
40

【化 1 2 5】

(F25)

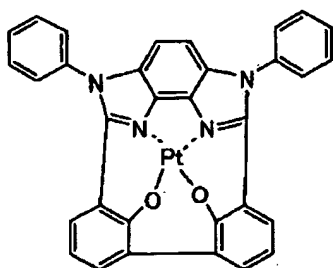


(F26)

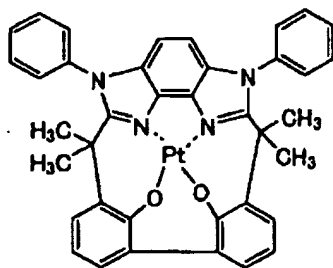


10

(F27)

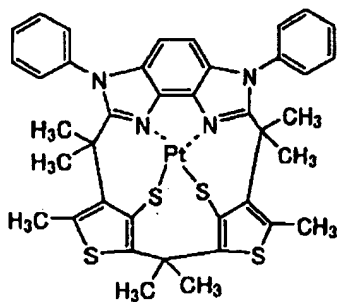


(F28)

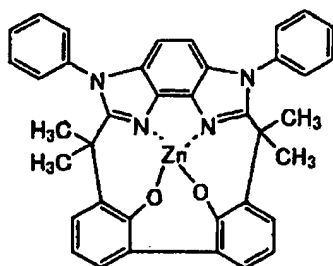


20

(F29)

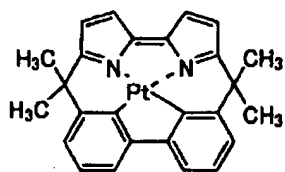


(F30)

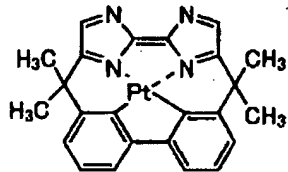


30

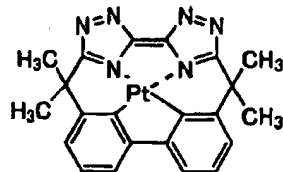
(F31)



(F32)



(F33)

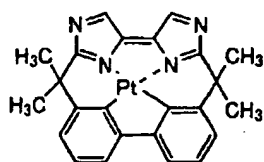


40

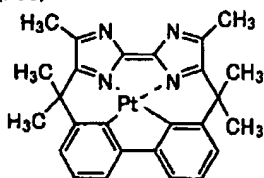
【 0 4 4 0 】

【化 1 2 6】

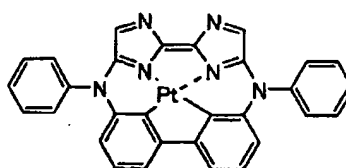
(F34)



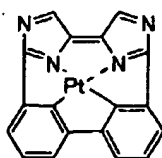
(F35)



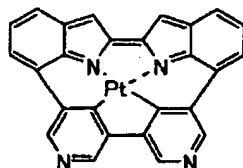
(F36)



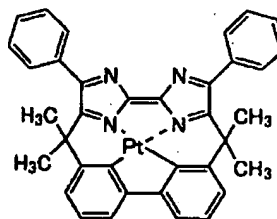
(F37)



(F38)

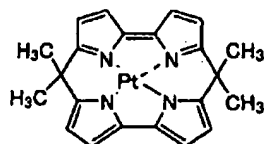


(F39)

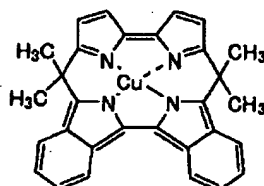


10

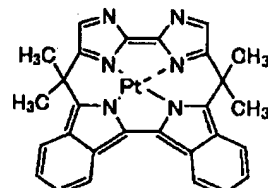
(F40)



(F41)

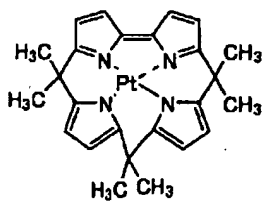


(F42)

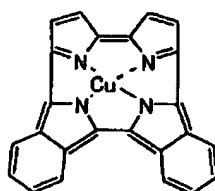


20

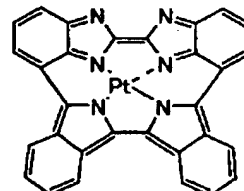
(F43)



(F44)



(F45)

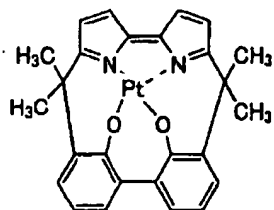


30

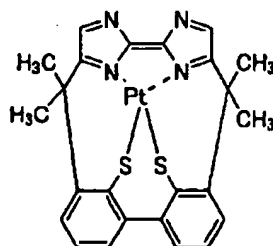
【 0 4 4 1】

【化 1 2 7】

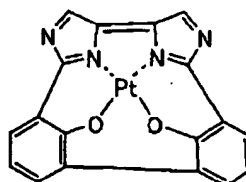
(F46)



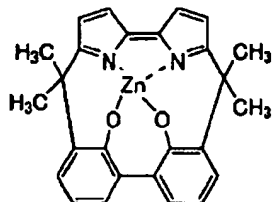
(F47)



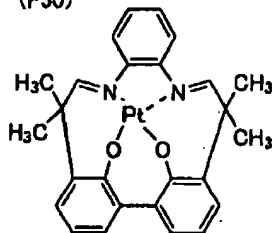
(F48)



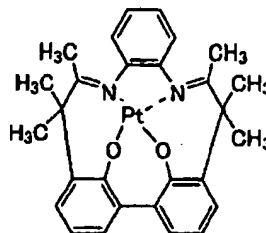
(F49)



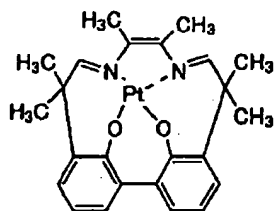
(F50)



(F51)



(F52)



10

20

【0 4 4 2】

前記一般式 (A-1) ~ (F-1) で表される化合物は公知の方法により合成することができる。

30

【0 4 4 3】

次に、本発明の有機電界発光素子の構成に関して説明する。

本発明の有機電界発光素子は、基板上に設けられた、陽極、陰極の一对の電極間に、少なくとも一層の有機層を有して構成される。該有機層は少なくとも一層の発光層を含み、発光層以外の他の有機層としては、正孔輸送層、正孔注入層、電子注入層、電子輸送層などが挙げられ、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層の層構成が中でも好ましい。

また、これらの各層はそれぞれ他の機能を備えたものであってもよく、同層が積層されてもよい。各層の形成には、それぞれ種々の材料を用いることができる。また、その他の層として保護層等を設けても良い。

40

【0 4 4 4】

<陽極>

陽極は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層などに正孔を供給するものであり、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、又はこれらの混合物などを用いることができ、好ましくは仕事関数が 4 eV 以上の材料である。

具体例としては、酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウムスズ (ITO) 等の導電性金属酸化物、あるいは金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの金属と導電性金属酸化物との混合物又は積層物、ヨウ化銅、硫化銅などの無機導電性物質、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどの有機導電性材料、及びこれらと ITO との積層物などが挙げられ、好ましくは、導電性金属酸化物であり、特に、生産性、

50

高導電性、透明性等の点からITOが好ましい。

陽極の膜厚は、材料により適宜選択可能であるが、通常10nm～5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは50nm～1μmであり、更に好ましくは100nm～500nmである。

【0445】

陽極は通常、上述した、ソーダライムガラス、無アルカリガラス、透明樹脂基板などの上に層形成したものが用いられる。ガラスを用いる場合、その材質については、ガラスからの溶出イオンを少なくするため、無アルカリガラスを用いることが好ましい。また、ソーダライムガラスを用いる場合、シリカなどのバリアコートをしたものを使用することが好ましい。透明樹脂基板としては、ポリエチレンテレフタレート、ポリブチレンテレフタレート、ポリエチレンナフタレート等のポリエステルや、ポリエチレン、ポリカーボネート、ポリエーテルスルホン、ポリアリレート、アリルジグリコールカーボネート、ポリイミド、ポリシクロオレフィン、ノルボルネン樹脂、ポリ(クロロトリフルオロエチレン)、テフロン(登録商標)、ポリテトラフルオロエチレン-ポリエチレン共重合体等の高分子材料が挙げられる。

基板の厚みは、機械的強度を保つのに十分であれば特に制限はないが、ガラスを用いる場合には、通常0.2mm以上、好ましくは0.7mm以上のものを用いる。

陽極の作製には、材料によって種々の方法が用いられるが、例えば、ITOの場合、電子ビーム法、スパッタリング法、抵抗加熱蒸着法、化学反応法(ゾルーゲル法など)、酸化インジウムスズの分散物の塗布などの方法で膜形成される。

陽極は、洗浄その他の処理により、素子の駆動電圧を下げたり、発光効率を高めることも可能である。例えばITOの場合、UV-オゾン処理、プラズマ処理などが効果的である。

【0446】

<陰極>

陰極は、電子注入層、電子輸送層、発光層などに電子を供給するものであり、電子注入層、電子輸送層、発光層などの負極と隣接する層との密着性やイオン化ポテンシャル、安定性等を考慮して選ばれる。

陰極の材料としては、金属、合金、金属ハロゲン化物、金属酸化物、電気伝導性化合物、又はこれらの混合物を用いることができ、具体例としてはアルカリ金属(例えば、Li、Na、K等)及びそのフッ化物又は酸化物、アルカリ土類金属(例えば、Mg、Ca等)及びそのフッ化物又は酸化物、金、銀、鉛、アルミニウム、ナトリウム-カリウム合金又はそれらの混合金属、リチウム-アルミニウム合金又はそれらの混合金属、マグネシウム-銀合金又はそれらの混合金属、インジウム、イッテルビウム等の希土類金属等が挙げられ、好ましくは仕事関数が4eV以下の材料であり、より好ましくはアルミニウム、リチウム-アルミニウム合金又はそれらの混合金属、マグネシウム-銀合金又はそれらの混合金属等である。

陰極は、上記化合物及びそれらの混合物の単層構造だけでなく、上記化合物及びそれらの混合物を含む積層構造を採ることもできる。例えば、アルミニウム/フッ化リチウム、アルミニウム/酸化リチウムの積層構造が好ましい。

陰極の膜厚は、材料により適宜選択可能であるが、通常10nm～5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは50nm～1μmであり、更に好ましくは100nm～1μmである。

陰極の作製には、電子ビーム法、スパッタリング法、抵抗加熱蒸着法、コーティング法、転写法などの方法が用いられ、金属を単体で蒸着することも、二成分以上を同時に蒸着することもできる。さらに、複数の金属を同時に蒸着して合金電極を形成することも可能であり、またあらかじめ調整した合金を蒸着させてもよい。

陽極及び陰極のシート抵抗は、低い方が好ましく、数百Ω/□以下が好ましい。

【0447】

<有機層>

本発明における有機層について説明する。

本発明の有機電界発光素子は、前述の製造方法を用いて製造される素子であり、少なくとも一層の発光層を含む有機層を有している。前述の通り、発光層以外に他の有機層を有していても良く、好ましく用いられる他の有機層としては、前記正孔輸送層、電子輸送層、正孔注入層、及び電子注入層の他、電荷ブロック層、励起子ブロック層等の各層が挙げられる。

前記3座以上の配位子を有する金属錯体を含有する有機層は、脱ガス処理後、蒸着法によって製造する必要があるが、中でも該有機層は発光層であることが好ましい。

該本発明の金属錯体を含有する有機層以外の有機層を構成する各層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、ディッピング、スピコート法、ディップコート法、キャスト法、ダイコート法、ロールコート法、バーコート法、グラビアコート法等の湿式製膜法、転写法、印刷法等いずれによっても好適に成膜することができるが、中でも蒸着法が好ましい。

10

本発明における3座以上の配位子を有する金属錯体を含有する有機層中の該金属錯体の含有率は、特に限定されず用いることができるが、耐久性、発光効率の観点から全固形物質量に対して0.1質量%~20質量%が好ましく、1質量%~15質量%がより好ましく、2質量%~12質量%が特に好ましい。本発明の化合物を含む有機層が複数層である場合は、個々の層が前記範囲となることが耐久性、発光効率の点で好ましい。

【0448】

(発光層)

20

発光層は、電界印加時に、陽極、又は正孔注入層、正孔輸送層から正孔を受け取り、陰極、又は電子注入層、電子輸送層から電子を受取り、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層である。

本発明における発光層としては、より優れた性能を得るために、あるいは高濃度の発光材料中で凝集が起こり励起状態が無輻射失活する現象(濃度消光)を防ぐために、電荷輸送機能と発光機能を分離して、発光材料をドーパントとして電荷輸送材料(ホスト材料)中にドーブする態様であることが好ましい。

【0449】

—電荷輸送材料(ホスト材料)—

発光層に適用されるホスト材料は、化合物を単独で用いることもできるが、複数の化合物を混合して使用しても良い。

30

ホスト材料としては、例えば、カルバゾールおよびその誘導体(例えば「アプライドフィジックス レターズ (Applied Physics Letters)」、1999、第74巻、第3号、p. 442に記載のもの)、トリベンゾアゼピンおよびその誘導体(特開平10-59943号、同10-219241号、同10-316875号、同10-324680号、同10-330365号、特開2001-97953号)、トリアゾールおよびその誘導体(米国特許第3112197号)、オキサゾールおよびその誘導体(米国特許第3257203号)、イミダゾールおよびその誘導体(特公昭37-16096号)、ポリアリーラルカンおよびその誘導体(米国特許第3615402号、同3820989号、同3542544号、特公昭45-5555号、同51-10983号、特開昭51-93224号、同55-17105号、同56-4148号、同55-108667号、同55-156953号、同56-36656号)、ポリアリールベンゼノイドおよびその誘導体(特開平10-255985号、特開2002-260861号)、アリールアミンおよびその誘導体(米国特許第3567450号、同3180703号、同3240597号、同3658520号、同4232103号、同4175961号、同4012376号、特公昭49-35702号、同39-27577号、特開昭55-144250号、同56-119132号、同56-22437号、西独特許第1110518号)、スチリルアントラセンおよびその誘導体(特開昭56-46234号)、スチルベンおよびその誘導体(特開昭61-210363号、同61-228451号、同61-14642号、同61-72255号、同62-47646号、同62-

40

50

36674号、同62-10652号、同62-30255号、同60-93445号、同60-94462号、同60-174749号、同60-175052号)、芳香族第三アミン化合物及びスチリルアミン化合物(特開昭63-295695号、同53-27033号、同54-58445号、同54-149634号、同54-64299号、同55-79450号、同55-144250号、同56-119132号、同61-295558号、同61-98353号、特開平8-239655号、米国特許第4127412号)、芳香族ジメチリデン系化合物(特開平6-330034号)、ピラゾリン誘導体及びピラズロン誘導体(米国特許第3180729号、同4278746号、特開昭55-88064号、同55-88065号、同49-105537号、同55-51086号、同56-80051号、同56-88141号、同57-45545号、同54-112637号、同55-74546号)、フェニレンジアミンおよびその誘導体(米国特許第3615404号、特公昭51-10105号、同46-3712号、同47-25336号、特開昭54-53435号、同54-110536号、同54-119925号)、アミノ置換カルコンおよびその誘導体(米国特許第3526501号)、フルオレノンおよびその誘導体(特開昭54-110837号)、ヒドラゾンおよびその誘導体(米国特許第3717462号、特開昭54-59143号、同55-52063号、同55-52064号、同55-46760号、同55-85495号、同57-11350号、同57-148749号)、シラザンおよびその誘導体(米国特許第4950950号)、ポルフィリン系化合物(特開昭63-295695号)、アントラキノジメタンおよびその誘導体及びアントロンおよびその誘導体(特開昭57-149259号、同58-55450号、同63-104061号、特開昭61-225151号、同61-233750号)、ジフェノキノンおよびその誘導体やチオピランジオキシドおよびその誘導体及びカルボジイミドおよびその誘導体(「ポリマー プレプリント、ジャパン(Polymer Preprints, Japan)」、1988、第37巻、第3号、p. 681)、フルオレニリデンメタンおよびその誘導体(特開昭60-69657号、同61-143764号、同61-148159号)、ジスチリルピラジンおよびその誘導体(「ケミストリー レターズ(Chemistry Letters)」、1990、p. 189、特開平2-252793号、特開平5-178842号)、複素環テトラカルボン酸無水物およびその誘導体(「ジャパニーズ ジャーナル オブ アプライド フィジックス(Japanese Journal of Applied Physics)」、1988、27巻、L269)、ポルフィリンやフタロシアニンおよびその誘導体(特開昭63-2956965号)、8-キノリノールおよびその誘導体の金属錯体(「電子情報通信学会論文誌」、1990、C-2、p. 661)、ベンゾオキサゾールおよびその誘導体を配位子とする金属錯体、及びベンゾチアゾールおよびその誘導体を配位子とする金属錯体等が挙げられる。

【0450】

また、ホスト材料の三重項励起状態から発光材料へのエネルギー授受が効率的に行われるためには、ホスト材料の最低三重項励起状態のエネルギーレベル(T_1 レベル)は発光材料の T_1 レベルよりも高いことが好ましい。発光材料の T_1 レベルはその発光波長が短いほど高くなるので、短波な発光素子用の発光層では高 T_1 のホスト材料が必要であるが、一方で T_1 はホスト材料の最高占有軌道(HOMO)と最低非占有軌道(LUMO)に関連し、これらは電荷の注入や輸送の能力に関わる(一般にHOMOとLUMOのエネルギー差が大きいほど電荷が注入されにくく、電氣的に絶縁性が高くなる)ため、最適な T_1 レベルのホスト材料を選択することが重要である。

特に、発光極大波長が500nm以下の青色発光素子用の発光層ホスト材料の T_1 レベルとしては、62kcal/mol以上(259kJ/mol以上)、85kcal/mol以下(355kJ/mol以下)であることが好ましく、65kcal/mol以上(272kJ/mol以上)、80kcal/mol以下(334kJ/mol以下)であることがより好ましい。

【0451】

本発明の発光層を構成する材料としては、蒸着法により形成するという観点から、分子量3000以下の材料のみを含有することが好ましい。特に、ポリマーやオリゴマーといった高分子材料は揮発性が低く蒸着が難しい上に、材料自体が分子量分布を有しており、再現性の良い発光が得にくいため好ましくない。

分子量3000を超える高分子量化合物は高真空条件下においても加熱により蒸発させること自体が難しくなり真空蒸着による薄膜形成が困難の傾向となる。

特に、200以上2000以下の範囲外の物質を選択すると、分子量200以下の低分子化合物は揮発性が高すぎて真空蒸着に際して薄膜形成することが難しく、分子量2000を超える高分子量化合物は高真空条件下においても加熱により蒸発させること自体が困難である傾向となるためである。

また、蒸着の容易性から、発光層を構成する材料はイオン性化合物ではなく、中性分子化合物であることが好ましい。

蒸着により形成された発光層薄膜は、剥離やピンホール等の欠陥が無い均一な非結晶性薄膜（アモルファス膜）であることが好ましく、経時や熱による再結晶化が起こると発光素子の性能変化や劣化に繋がるため、融点及びガラス転位温度（ T_g ）は、高いことが好ましい。発光層を構成する材料の融点としては、好ましくは150℃以上、より好ましくは200℃以上、さらに好ましくは250℃以上、 T_g は好ましくは70℃以上、より好ましくは100℃以上、さらに好ましくは120℃以上である。

上記のような要求性能を満たすホスト材料としては、 T_1 レベルが高く、結晶化が起こりにくく、励起状態の寿命が長く発光効率の高さが期待できるカルバゾール誘導体が最も好ましい。

【0452】

－発光材料－

本発明においては上述のように本発明の金属錯体を使用するが、単一化合物として用いても複数用いてよい。また、他の発光材料と併用して用いることもできる。併用してもよい発光材料は、一重項励起子から発光する蛍光発光性化合物、又は、三重項励起子から発光する燐光発光性化合物のいずれであってもよい。

本発明において併用して使用できる発光材料の例としては、ベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、スチリルベンゼン誘導体、ポリフェニル誘導体、ジフェニルブタジエン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ナフタルイミド誘導体、クマリン誘導体、縮合芳香族化合物、ペリノン誘導体、オキサジアゾール誘導体、オキサジン誘導体、アルダジン誘導体、ピラリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、ビススチリルアントラセン誘導体、キナクリドン誘導体、ピロロピリジン誘導体、チアジアゾロピリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、スチリルアミン誘導体、ジケトピロロピロール誘導体、芳香族ジメチリデン化合物、8-キノリノール誘導体の金属錯体やピロメテン誘導体の金属錯体、希土類錯体、イリジウムトリスフェニルピリジン錯体及び白金ポルフィリン錯体等の遷移金属錯体に代表される各種金属錯体等、ポリチオフェン、ポリフェニレン、ポリフェニレンビニレン等のポリマー化合物、有機シラン誘導体などの化合物等が挙げられる。

【0453】

発光層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常1nm～5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは5nm～1μmであり、更に好ましくは10nm～500nmである。

発光層は単一層であっても複数層であってもよく、それぞれの発光層が異なる発光色で発光して、全体として例えば白色を発光してもよいし、単一の発光層から白色を発光してもよい。発光層が複数の場合、それぞれの発光層は単一材料で形成されていてもよいし、複数の化合物で形成されていてもよい。例えば、ホスト材料と発光材料とを含む混合系の場合であれば、ホスト材料は単一であっても複数種の混合であってもよい。発光材料も単一であっても複数種の混合であってもよい。

本発明における発光層中における3座以上の配位子を有する金属錯体の含有率は特に限

10

20

30

40

50

定されず用いることができるが、耐久性、発光効率の観点から、全固形物質量に対して 0.1 質量%~20 質量%が好ましく、1 質量%~15 質量%がより好ましく 2 質量%~12 質量%が特に好ましい。

前記ホスト材料の含有率は特に限定されず用いることができるが、全固形物質量に対して、80 質量%~99.9 質量%が好ましく、85 質量%~99 質量%がより好ましく 88 質量%~98 質量%が特に好ましい。

【0454】

次に、本発明に好ましく用いられる他の有機層について説明する。

(正孔注入層、正孔輸送層)

正孔注入層、正孔輸送層に含まれる材料としては、陽極から正孔を注入する機能、正孔を輸送する機能、陰極から注入された電子を障壁する機能のいずれか有しているものであればよい。

正孔注入層、正孔輸送層を構成する材料としては、トリベンゾアゼピンおよびその誘導体、トリアゾールおよびその誘導体、オキサゾールおよびその誘導体、オキサジアゾールおよびその誘導体、イミダゾールおよびその誘導体、ポリアリールアルカンおよびその誘導体、ポリアリールベンゼンおよびその誘導体、アリールアミンおよびその誘導体、スチリルアントラセンおよびその誘導体、スチルベンおよびその誘導体、芳香族第三アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、8-キノリノールおよびその誘導体の金属錯体、ピラゾリンおよびその誘導体、ピラズロンおよびその誘導体、フェニレンジアミンおよびその誘導体、アミノ置換カルコンおよびその誘導体、フルオレノンおよびその誘導体、ヒドラゾンおよびその誘導体、シラザンおよびその誘導体、本発明の金属錯体及びポルフィリン系化合物の群から選択される 1 種以上であることが好ましい。これらの化合物の好ましい例は前記併用可能なホスト材料の項で述べた対応する化合物の例と同様のものを挙げるができる。

【0455】

さらに、正孔輸送層が、燐光発光性化合物を含む発光層に隣接する層である場合には、発光層で生じた三重項励起子が正孔輸送層へ移動しないように正孔輸送材料の最低三重項励起状態のエネルギーレベル (T_1 レベル) は発光材料や発光層に含まれるホスト材料の T_1 レベルよりも高いことが好ましい。特に発光極大波長が 500 nm 以下の青色発光素子用の正孔輸送材料の T_1 レベルは 62 kcal/mol 以上 (259 kJ/mol 以上)、85 kcal/mol 以下 (355 kJ/mol 以下) であることが好ましく、65 kcal/mol 以上 (272 kJ/mol 以上)、80 kcal/mol 以下 (334 kJ/mol 以下) であることがより好ましい。

上記物性値を満たす正孔輸送材料としては、特開 2002-100476 号公報に記載の正孔輸送材料が好ましく、好ましい範囲も同公報に記載のとおりである。

前記の化合物群のうちトリベンゾアゼピン誘導体は高 T_1 で高い発光効率が期待でき、アリールアミン誘導体は高い安定性により耐久性向上が期待できるため、この両者から正孔輸送材料を選択することがより好ましい。

その他として、必要に応じてカルバゾール、ポリシラン系化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン、カーボン膜、及びそれらの誘導体等を添加することができる。

【0456】

正孔注入層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常 0.2 nm~1 μ m の範囲のものが好ましく、より好ましくは 1 nm~0.2 μ m であり、さらに好ましくは 2 nm~100 nm である。

正孔輸送層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常 1 nm~5 μ m の範囲のものが好ましく、より好ましくは 5 nm~1 μ m であり、さらに好ましくは 10 nm~500 nm である。

正孔注入層、正孔輸送層は上述した材料の 1 種又は 2 種以上からなる単層構造であって

もよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0457】

前記本発明の金属錯体を含むときの正孔注入層、正孔輸送層の形成方法としては、前記脱ガス処理工程及び蒸着法により形成するが、それを含有しないときは、特に限定されず、真空蒸着法以外に、LB法、前記正孔注入輸送材料を溶媒に溶解又は分散させてコーティングする方法、インクジェット法、印刷法、転写法が用いることができる。

コーティング法の場合、該正孔注入輸送材料を樹脂成分と共に溶解又は分散することができ、樹脂成分としては例えば、ポリ塩化ビニル、ポリカーボネート、ポリスチレン、ポリメチルメタクリレート、ポリブチルメタクリレート、ポリエステル、ポリスルホン、ポリフェニレンオキシド、ポリブタジエン、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、炭化水素樹脂、ケトン樹脂、フェノキシ樹脂、ポリアミド、エチルセルロース、酢酸ビニル、ABS樹脂、ポリウレタン、メラミン樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、アルキド樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂などが挙げられる。

【0458】

前記の層形成方法の中でも、正孔輸送層は蒸着法で設置されていることが好ましい。蒸着法で設置することにより、均一で一定の膜厚の薄膜が形成でき、耐久性も向上する傾向となる。

また正孔輸送層を蒸着法で設置する場合、正孔輸送層の材料も発光層材料と同様に分子量3000以下の低分子有機化合物及び／又は分子量3000以下の低分子有機金属化合物からなることが好ましい。

【0459】

(電子注入層、電子輸送層)

電子注入層、電子輸送層に含まれる材料としては、陰極から電子を注入する機能、電子を輸送する機能、陽極から注入された正孔を障壁する機能のいずれか有しているものであればよい。

【0460】

電子注入層、電子輸送層に用いる材料の具体例としては、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、フルオレノン、アントラキノジメタン、アントロン、ジフェニルキノン、チオピランジオキシド、カルボジイミド、フルオレニリデンメタン、ジスチリルピラジン、ナフタレン、ペリレン等の芳香環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン、8-キノリノールの金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、有機シラン、それらの誘導体、及び本発明の金属錯体等が挙げられる。これらの化合物の好ましい例は、前記ホスト材料の説明で述べた対応する化合物の例と同様のものを挙げることもできる。

【0461】

また、本発明の有機電界発光素子は、陰極と発光層の間にイオン化ポテンシャル5.9 eV以上(より好ましくは6.0 eV以上)の化合物を含む層を用いるのが好ましく、発光層に隣接してイオン化ポテンシャル5.9 eV以上の電子輸送層を用いるのがより好ましい。陰極と発光層の間にイオン化ポテンシャル5.9 eV以上(より好ましくは6.0 eV以上)の化合物を含む層を設けることにより正孔が発光層を貫通して電子輸送層に流れ込むことによる発光効率低下や耐久性悪化を防止することができる。

【0462】

さらに、電子輸送層が、燐光発光性化合物を含む発光層に隣接する層である場合には、発光層で生じた三重項励起子が電子輸送層へ移動しないように電子輸送材料の最低三重項励起状態のエネルギーレベル(T_1 レベル)は発光材料や発光層ホスト材料の T_1 レベルよりも高いことが好ましい。特に発光極大波長が500 nm以下の青色発光素子用の正孔輸送材料の T_1 レベルは62 kcal/mol以上(259 kJ/mol以上)、85 kcal/mol以下(355 kJ/mol以下)であることが好ましく、65 kcal/mol以上(272 kJ/mol以上)、80 kcal/mol以下(334 kJ/mol以下)であることが好ましい。

以下)であることがより好ましい。

上記物性値を満たす他の電子輸送材料としては、特開2002-100476号公報に記載の電子輸送材料が挙げられ、その好ましい範囲も同公報に記載の通りである。

【0463】

その他として、必要に応じてカルバゾール、ポリシラン系化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン、カーボン膜、及びそれらの誘導体等を添加することができる。

【0464】

電子注入層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常0.2nm~1μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは1nm~0.2μmであり、さらに好ましくは2nm~100nmである。

電子輸送層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常1nm~5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは5nm~1μmであり、さらに好ましくは10nm~500nmである。

電子注入層、電子輸送層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

前記本発明の金属錯体を含有するときの電子注入層、電子輸送層の形成方法としては、前記脱ガス処理工程及び蒸着法により形成するが、それを含有しないときは、特に限定されず、真空蒸着法以外に、LB法、前記電子注入輸送材料を溶媒に溶解又は分散させてコーティングする方法、インクジェット法、印刷法、転写法などが用いることができる。

コーティング法の場合、該電子注入輸送材料を樹脂成分と共に溶解又は分散することができ、樹脂成分としては例えば、正孔注入輸送層の場合に例示したものが適用できる。

前記の層形成方法の中でも、電子輸送層は蒸着法で設置されていることが好ましい。蒸着法で設置することにより、均一で一定の膜厚の薄膜が形成でき、耐久性も向上する傾向となる。

また、電子輸送層を蒸着法で設置する場合、電子輸送層の材料も発光層材料と同様に分子量3000以下の低分子有機化合物及び/又は分子量3000以下の低分子有機金属化合物からなることが好ましい。

【0465】

(保護層)

本発明の有機電界発光素子は、水分や酸素の進入を防止するために保護層を有してもよい。保護層に含まれる材料としては、水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入ることを抑止する機能を有しているものであればよい。

その具体例としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni等の金属、MgO、SiO、SiO₂、Al₂O₃、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe₂O₃、Y₂O₃、TiO₂等の金属酸化物、MgF₂、LiF、AlF₃、CaF₂等の金属フッ化物、SiN_x、SiO_xN_yなどの窒化物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリウレア、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリジクロロジフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの共重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも1種のモノマーを含むモノマー混合物を共重合させて得られる共重合体、共重合主鎖に環状構造を有する含フッ素共重合体、吸水率1%以上の吸水性物質、吸水率0.1%以下の防湿性物質等が挙げられる。

保護層の形成方法についても特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE(分子線エピタキシ)法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法(高周波励起イオンプレーティング法)、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、ガスソースCVD法、コーティング法、印刷法、転写法を適用できる。

【0466】

<封止>

さらに、本発明の有機電界発光素子は、封止容器を用いて素子全体を封止してもよい。

また、封止容器と発光素子の間の空間に水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。水分吸収剤としては、特に限定されることはないが、例えば、酸化バリウム、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、五酸化リン、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、塩化銅、フッ化セシウム、フッ化ニオブ、臭化カルシウム、臭化バナジウム、モレキュラーシーブ、ゼオライト、酸化マグネシウム等を挙げることができる。不活性液体としては、特に限定されることはないが、例えば、パラフィン類、流動パラフィン類、パーフルオロアルカンやパーフルオロアミン、パーフルオロエーテル等のフッ素系溶剤、塩素系溶剤、シリコンオイル類が挙げられる。

10

【0467】

本発明の発光素子は、種々の公知の工夫により、光取り出し効率を向上させることができる。例えば、基板表面形状を加工する（例えば微細な凹凸パターンを形成する）、基板・ITO層・有機層の屈折率を制御する、基板・ITO層・有機層の膜厚を制御すること等により、光の取り出し効率を向上させ、外部量子効率を向上させることが可能である。

【0468】

本発明の発光素子は、陽極側から発光を取り出す、いわゆる、トップエミッション方式であっても良い。

【0469】

本発明の有機電界発光素子は、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信等に好適に利用できる。

20

【0470】

本発明の有機電界発光素子は、陽極と陰極との間に直流（必要に応じて交流成分を含んでもよい）電圧（通常2ボルト～15ボルト）、又は直流電流を印加することにより、発光を得ることができる。本発明の有機電界発光素子の駆動方法については、特開平2-148687号、同6-301355号、同5-29080号、同7-134558号、同8-234685号、同8-241047号の各公報、特許第2784615号公報、米国特許5828429号、同6023308号の各明細書、等に記載の駆動方法を適用することができる。

30

【0471】

本発明における有機電界発光素子の駆動耐久性は、特定の輝度における輝度半減時間により測定することができる。例えば、KEITHLEY製ソースメジャーユニット2400型を用いて、直流電圧を有機電界発光素子に印加して発光させ、初期輝度2000cd/m²の条件で連続駆動試験をおこない、輝度が1000cd/m²になった時間を輝度半減時間T（1/2）として、該輝度半減時間を従来発光素子と比較することにより求めることができる。本発明においてはこの数値を用いた。

この有機電界発光素子の重要な特性値として、外部量子効率がある。外部量子効率は、「外部量子効率 ϕ ＝素子から放出された光子数／素子に注入された電子数」で算出され、この値が大きいほど消費電力の面で有利な素子と言える。

40

【0472】

また、有機電界発光素子の外部量子効率は、「外部量子効率 ϕ ＝内部量子効率×光取り出し効率」で決まる。有機化合物からの蛍光発光を利用する有機電界発光素子においては、内部量子効率の限界値が25%であり、光取り出し効率が約20%であることから、外部量子効率の限界値は約5%とされている。

【0473】

素子の外部量子効率としては、消費電力を下げられる点、駆動耐久性を上げられる点で、6%以上が好ましく、12%以上が特に好ましい。

該外部量子効率の数値は、20℃で素子を駆動したときの外部量子効率の最大値、もし

50

くは、 20°C で素子を駆動した時の $100\sim 300\text{cd}/\text{m}^2$ 付近（好ましくは $200\text{cd}/\text{m}^2$ ）での外部量子効率の値を用いることができる。

本発明においては、KEITHLEY製ソースメジャーユニット2400型を用いて、直流定電圧をEL素子に印加して発光させ、その輝度をトプコン社製輝度計BM-8を用いて測定し、 $200\text{cd}/\text{m}^2$ における外部量子効率を算出した値を用いる。

【0474】

また、発光素子の外部量子効率は、発光輝度、発光スペクトル、電流密度を測定し、その結果と比視感度曲線から算出することができる。すなわち、電流密度値を用い、入力した電子数を算出することができる。そして、発光スペクトルと比視感度曲線（スペクトル）を用いた積分計算により、発光輝度を発光したフォトン数に換算することができる。これらから外部量子効率（%）は、「（発光したフォトン数／素子に入力した電子数） $\times 100$ 」で計算することができる。

【0475】

本発明により製造された発光素子は、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信等の分野に好適に使用できる。

【実施例】

【0476】

本発明について実施例を用いて説明するが、これに限定されるものではない。

（比較例1）

<サンプル1-1の作成>

厚さ 0.7mm 、 2.5cm 角のガラス基板に In_2O_3 含有率が95質量%であるITOターゲットを用いて、DCマグネトロンスパッタ（条件：基材温度 100°C 、酸素圧 $1\times 10^{-3}\text{Pa}$ ）により、透明陽極としてのITO薄膜（厚み $0.2\mu\text{m}$ ）を形成した。ITO薄膜の表面抵抗は $10\Omega/\square$ であった。

次に、前記透明陽極を形成した基板を洗浄容器に入れ、IPA洗浄した後、これにUV-オゾン処理を30分おこなった。

続いて、前記透明陽極を形成した基板を真空蒸着装置に設置し、この透明陽極上に銅フタロシアニンを真空蒸着法にて、 $0.5\text{nm}/\text{秒}$ の速度で膜厚 10nm の正孔注入層を設けた。

その上に、 $4, 4', 4''$ -トリス（2-メチルフェニルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（ $m\text{-MTDATA}$ ）を真空蒸着法にて $0.5\text{nm}/\text{秒}$ の速度で膜厚 40nm の正孔輸送層を設けた。

この上に発光層として、本発明の金属錯体EM-1（前記一般式（I）で表される化合物の具体例の化合物（83）に相当）、ホスト材料として化合物H-1および化合物E-1を真空蒸着法にて8/50/42の割合で共蒸着して、膜厚 30nm の発光層を設けた。金属錯体の収納容器にはタングステン製の金属ボートを用い、抵抗加熱により加熱し、蒸着した。蒸着速度を $0.1\text{nm}/\text{秒}$ となるように、温度を制御した。その時の温度は約 $220^{\circ}\text{C}\sim 270^{\circ}\text{C}$ の範囲であった。発光層の蒸着開始時の真空度は $1\times 10^{-4}\text{Pa}$ であった。

【0477】

発光層の上に、電子輸送層中の電子輸送材料として BaIq_2 を真空蒸着法にて $0.5\text{nm}/\text{秒}$ の速度で膜厚 10nm 蒸着し、その上に、電子輸送材料として Alq_3 を真空蒸着法にて $0.2\text{nm}/\text{秒}$ の速度で蒸着して膜厚 35nm の電子輸送層を設けた。

さらにこの電子輸送層上にパターンニングしたマスク（発光面積が $2\text{mm}\times 2\text{mm}$ となるマスク）を設置し、フッ化リチウムを真空蒸着法にて蒸着して 1nm の電子注入層を設けた。

この上にアルミニウムを真空蒸着法にて蒸着し $0.15\mu\text{m}$ の陰極を設けた。

前記陽極及び陰極より、それぞれアルミニウムのリード線を結線し、発光積層体を形成した。

【0478】

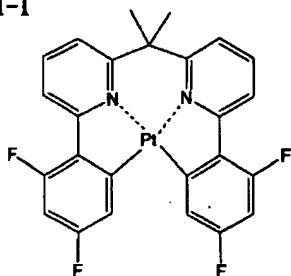
得られた発光積層体をアルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、乾燥剤を設けたステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤（XNR5516HV、長瀬チバ製）を用いて封止し、サンプル1-1を得た。

上記の銅フタロシアニンの蒸着から封止までの作業は、真空または窒素雰囲気下で行い、大気に暴露することなく素子作製を行った。

【0479】

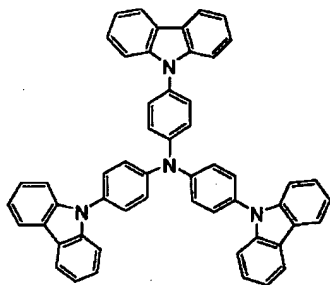
【化128】

EM-1

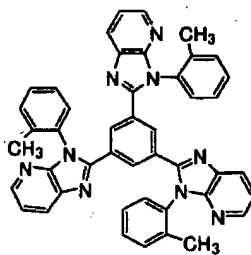


10

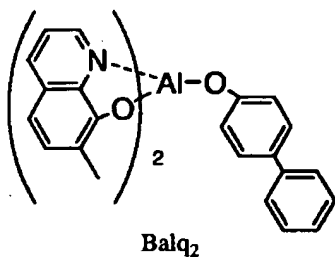
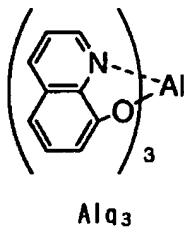
H-1



E-1



20

Balq₂Alq₃

30

【0480】

(実施例1)

40

<サンプル1-2の作成>

サンプル1-1の作成方法において、前記本発明の金属錯体EM-1の蒸着の前に、脱ガス処理を行った。脱ガス処理の間は基板に蒸着されないようにシャッターを用いて遮蔽し、真空計でモニターしながら徐々に蒸着材料を加熱し、真空装置内の圧力が上がり始めた温度で保持した。その時の温度はおよそ200℃であった。圧力上昇が終わった後、加熱を停止し、真空度が 1×10^{-4} Paになるまで再度脱気して、脱ガス工程を終了した。以降、サンプル1-1と全く同様にして素子を作成し、サンプル1-2を得た。

【0481】

(比較例2)

<サンプル2-1, 2-2の作成>

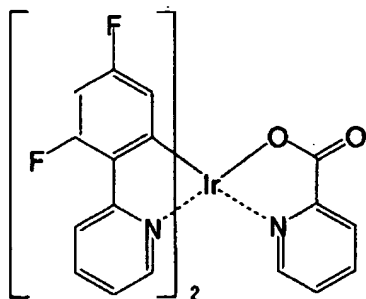
50

サンプル 1-1, 1-2 の作成において、前記金属錯体 EM-1 の代わりに FIrpic (2 座配位子錯体) を使用した以外は、サンプル 1-1, 1-2 と同様に行い、サンプル 2-1, 2-2 を得た。

【0482】

【化129】

FIrpic



10

【0483】

〔評価〕

上記により得られた発光素子を用いて、以下の方法で評価を行った。

20

－外部量子効率－

作製した発光素子の発光スペクトルの波形は、浜松フotonクス社製のマルチ・チャンネル・アナライザー PMA-11 を用いて測定した。この測定データより発光ピークの波長の値を求めた。更に、この発光スペクトルの波形と測定時の電流・輝度 (200 cd/m^2) から外部量子効率を計算し、下記の基準に従い評価した。結果は、下記表 1 に記載した。

【0484】

〔評価基準〕

◎：10%以上

○：5%以上10%未満

△：3%以上5%未満

×：3%未満

30

【0485】

－駆動耐久性試験－

KEITHLEY 製ソースメジャーユニット 2400 型を用いて、初期輝度 300 cd/m^2 になるように直流電圧を有機電界発光素子に印加し、連続駆動試験をおこない、輝度が 150 cd/m^2 になった時間を輝度半減時間 $T(1/2)$ とした。該輝度半減時間を下記の評価基準に従い評価した。

【0486】

〔評価基準〕

◎：300hr 以上

○：150hr 以上 300hr 未満

△：100hr 以上 150hr 未満

×：100hr 未満

40

【0487】

－発光面状－

得られた素子の発光面状を目視で確認し、ダークスポットや輝点の発生の有無を評価した。

【0488】

【表 1】

No.	金属鍍体 種	脱ガス 処 理	蒸着材料 温度 (°C)		外部量子効 率	駆動 耐久性	発光面状 (発生の有無)	
			脱ガス処理 工程	蒸着 工程				
1-1	EM-1	なし	-	220~270	○	◎	発生なし	比較例
1-2	"	あり	200	220~270	◎	◎	発生なし	本発明
1-3	Firpic	なし	-	220~270	△	△	発生なし	比較例
1-4	"	あり	200	220~270	×	×	ダークスポット 発生	比較例

【0489】

表1より明らかな通り、本発明の製造方法により得られた素子は、素子の発光効率が改良され、かつ駆動耐久性に優れ、かつ発光面状も良好である。それに対して、比較サンプル1-4では、脱ガス処理を行うことで、発光効率も、耐久性も悪化し、発光面状も悪化している。定かではないが、脱ガス処理により、発光材料が変性し、それが蒸着されたため、素子に影響したと思われる。

【0490】

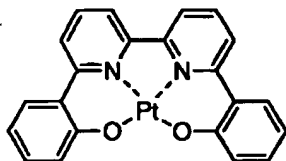
(実施例 2)

実施例 1 のサンプル 1-2 の作成において、前記金属錯体 EM-1 の代わりに下記本発明の金属錯体 EM-2 を使用した以外は、サンプル 1-2 同様にサンプル作成を行い、実施例 1 と同様にして評価を行ったところ、実施例 1 と同様に良好な結果を得た。

【0491】

【化130】

EM-2



10

【0492】

以上より、本発明により、本発明の金属錯体を用い、脱ガス処理を行うことにより高品質な有機電界発光素子を得ることが分かる。

【産業上の利用可能性】

【0493】

20

本発明の製造方法により得られた有機電界発光素子は、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信等の分野に好適に使用できる。